

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

研究進捗状況報告書の概要

1 研究プロジェクト

学校法人名	立教学院	大学名	立教大学
研究プロジェクト名	設計に基づく分子自在制御の化学		
研究観点	研究拠点を形成する研究		

2 研究プロジェクトの目的・意義及び計画の概要

化学の目的の一つは、分子の構造を様々に変えることでその性質を自在に制御し、新規な機能性を持った分子・分子材料を開発していくことにある。従来、機能分子の開発は、主に天然に存在する分子を手本として試行錯誤的に分子構造を変換することにより行われてきた。しかし、優れた機能を持つ分子・分子材料を合目的的に創製するには、機能の本質の理論化学的解析とそれに基づく「分子設計」、それを基とした「合成」と、構造・物性の「計測」、さらにその機能の「評価」を行い、それを理論化学的解析にフィードバックするサイクルを確立する必要がある。本研究プロジェクトは、実験と計算が密接に連携し、「設計」「合成」「計測」「評価」のサイクルを確立し、新たな課題解決型研究システムを構築することを目指すものである。また、このシステムを確立することにより、革新的な機能を持つ分子・分子材料の開発を目指した。具体的には、計算による分子設計を担当する「設計グループ」と、実験的に機能分子の構築を行う「反応制御グループ」並びに「物性・機能制御グループ」を設け、これらのグループが互いに成果をフィードバックし合うことにより、機能分子・分子材料開発を行った。このような課題解決型研究システムの構築により、学術的には化学の新たな方法論を確立し、さらには革新的な機能を持つ分子・分子材料、例えば光メモリ、光駆動アクチュエーター、ドラッグデリバリーシステム、環境応答機能触媒、不斉合成触媒、水の光分解触媒、生分解性人工ポリマーなどを開発することを目指している。

3 研究プロジェクトの進捗及び成果の概要

本プロジェクトでは、初年度に計算システム増強のための大規模サーバーと分子構造・機能の計測システムを導入するとともに、既存の設備を本プロジェクト推進に向けて整備し、研究プロジェクトを進めるための研究活動拠点を確立した。それらを用いた研究プロジェクトの進捗及び成果の概要は以下のとおりである。

「設計グループ」においては、本研究課題がターゲットとする知的応答機能分子材料に対して、機能性の解析及び分子設計を行うための FMO 計算の高速化、高機能化を行い、FMO プログラム ABINIT-MP を「京」コンピュータの上に移植し、ライブラリとして提供した。また、実験グループが開発を目指す、効率的に光学活性化合物を提供する不斉分子触媒、酸化還元活性を示す金属錯体触媒、特異な分子構造を有するテルル超原子価化合物について高精度量子化学計算を行い、それらの機能性の要因を理論的に解析した。液体クロマトグラフィーの分離過程モデルについても分子動力学計算を行い、溶媒に依存した挙動の違いを理論的に解析した。非接触スイッチ特性を有する光応答性分子を超高解像度顕微鏡などのバ

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

イオプローブとして利用することを目指した研究においては、各種糖置換基を導入した新規ジアリールエテン分子を設計開発し、水溶性の向上に成功して卵細胞やウイルスに対してバイオプローブとして応用した。以上の研究成果は、学内外の共同研究によって、計算と実験の緊密な連携によって達成されている。

「反応制御グループ」では、設計グループと協力しながら機能性分子および分子材料の合成とその機能発現メカニズムの解明を行った。とくに設計グループとの緊密な連携で進展した研究としては、環状配位子を導入した白金錯体による新規な触媒作用の発見があげられる。また、酸化還元反応を触媒する複核金属錯体を開発し、特に水の酸化反応の実現に向けて大きな進展が見られた。また、分析化学の基礎研究として重要なクロマトグラフィー挙動について、実験、計算両面からモーメント式を用いた解析の有用性を実証した。高周期典型元素の化学の研究を推進し、6 価テルルを含む超原子価化合物が高い安定性を持つ上に官能基化が可能であることを見出し、新しいオクタヘドラル構造をもつ分子群の合成を行った。他、種々の酸化状態を有する硫黄原子を含む化合物の研究を系統的に行い、生理活性物質として存在が予想されていた高反応性不飽和スルフェン酸(R-SOH)の合成・単離・構造解析に初めて成功した。天然物に着目した研究としては、植物成分である *L. vellerea* と *L. melanothyrsa* の成分面における関連性などを明らかにし、天然物の構造決定に向けてビサボランセスキテルペンのモデル化合物の合成も行った。

「物性・機能制御グループ」では、設計グループと協力しながら、特に光応答機能を有する様々な分子の開発を行った。その結果、光照射により蛍光性を on/off するフォトクロミックジアリールエテンについて、様々な化学修飾を施すことにより開環反応量子収率の制御と水溶化に成功するとともに、反応点にペリレンを導入する可視光応答フォトクロミック分子の新しい設計指針を得ることができた。さらに、スルホン化ビスベンゾチエニルエテン誘導体が単結晶状態においてフォトクロミズムと turn-on 型蛍光スイッチングを示すこと、イミダゾールを有するフォトクロミック分子が結晶状態で水素結合一次元鎖を形成し、フォトクロミズムを示すことを見出した。また、有機カチオンのジヒドロピリジニウムイオンとヘキサシアニド鉄酸イオンで構成される新規電荷移動塩を合成し、これが珍しい酸蒸気による三色系のベイポクロミック現象を発現することを見出し、単結晶構造解析により、この色変化の原因である構造変化を明らかにした。さらに、アントラセン誘導体をゲストとした超分子カプセルの光物理過程と光安定性の 1 分子計測による統計分析を行い、カプセル包接によりゲストの光退色収率が 1/10 程度まで抑制され、代表的な蛍光色素であるローダミン 6G の 30 倍以上の光安定性を示すことを明らかにした。高機能高分子材料の開発においては、熱誘起相分離により sc-PLA から成る塊状多孔質体を生成し、sc 化により耐熱性だけでなく耐薬品性も著しく向上することを見出した。また、スーパーエンジニアリングプラスチックとポリプロピレン (PP) をアロイ化することにより、PP の難燃化・耐熱化を達成するなどの成果を得た。光触媒開発の基礎研究として、高活性光触媒として注目されている二次元 TiO₂ ナノシートの電子状態の解明を目的として、これを金属表面上に薄膜単結晶として合成することを目指した研究を行い、TiO₂ ナノシートと格子の整合する Ag(110)上に、(1 × 1)TiO₂ 薄膜を合成することに成功した。

以上のように、本プロジェクトはほぼ計画通り進行している。

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

**平成 25 年度選定「私立大学戦略的研究基盤形成支援事業」
研究進捗状況報告書**

- 1 学校法人名 立教学院 2 大学名 立教大学
- 3 研究組織名 未来分子研究センター
- 4 プロジェクト所在地 東京都豊島区西池袋3-34-1
- 5 研究プロジェクト名 設計に基づく分子自在制御の化学
- 6 研究観点 研究拠点を形成する研究

7 研究代表者

研究代表者名	所属部局名	職名
枝元 一之	理学研究科	教授

- 8 プロジェクト参加研究者数 22名
- 9 該当審査区分 理工・情報 生物・医歯 人文・社会

10 研究プロジェクトに参加する主な研究者

研究者名	所属・職名	プロジェクトでの研究課題	プロジェクトでの役割
【学内】			
望月 祐志	理学研究科・教授	計算化学手法の開発と先導的応用	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)
常盤 広明	理学研究科・教授	未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発	〃
山中 正浩	理学研究科・教授	理論設計支援による機能分子触媒の開発	〃
ホーン・エルンスト	理学研究科・教授	Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions	2. 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)
黒田 智明	理学研究科・教授	自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性	〃
和田 亨	理学研究科・准教授	論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発	〃

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

宮部 寛志	理学研究科・教授	流通式分離系を利用する化学特性解析	〃
箕浦 真生	理学研究科・教授	高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発	〃
鈴木 望	理学研究科・助教	分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析	〃
枝元 一之	理学研究科・教授	表面反応を利用した高機能触媒の開発	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)
入江 正浩	未来分子研究センター・客員研究員	光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成	〃
松下 信之	理学研究科・教授	外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価	〃
森本 正和	理学研究科・准教授	結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製	〃
大山 秀子	理学研究科・教授	高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明	〃
三井 正明	理学研究科・教授	時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクスの解明	〃
上谷 幸治郎	理学研究科・助教	天然高分子材料を用いた機能材料の創製	〃
【学外】			
古明地 勇人	産業技術総合研究所・主任研究員	分子動力学手法の開発と応用	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)
福澤 薫	日本大学松戸歯学部科学教室・助教	計算化学の先導的・実証的応用計算	〃
吉澤 一成	九州大学先導物質化学研究所・教授	単一分子伝導の光制御に関する理論的研究	〃
都築 誠二	産業技術総合研究所・上級主任研究員	計算化学手法を用いた分子間相互作用の精密解析	〃
池田 潔	広島国際大	未来志向型機能を有する	3. 物性に基づく機能を

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

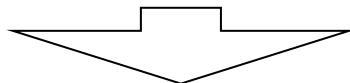
	学薬学部・教授	バイオプローブの合成開発	有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)
大坪 忠宗	広島国際大学・薬学部・准教授	未来志向型機能を有するバイオプローブの合成開発	〃

<研究者の変更状況(研究代表者を含む)>

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
機能分子を配位または内包した金属-酸化物複合ナノクラスターの創製と評価	理学研究科・助教	掛札 洋平	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

(変更の時期:平成 26 年 3 月 31 日)



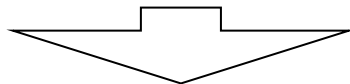
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
単結晶金電極への機能性化合物の吸着	理学研究科・教授	池澤 泰成	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

(変更の時期:平成 26 年 3 月 31 日)



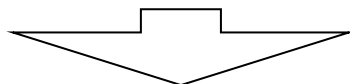
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・教授	三井 正明	3. 物性に基づく機能

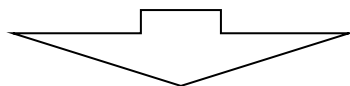
法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)
--	--	--	-----------------------------

旧

プロジェクト外での研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



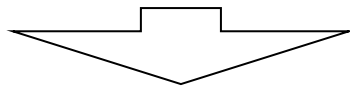
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・助教	上谷 幸治郎	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

旧

プロジェクト外での研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



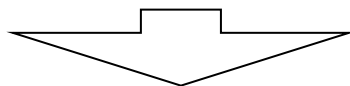
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	産業技術総合研究所・上級主任研究員	都築 誠二	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

旧

プロジェクト外での研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



新

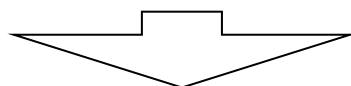
変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	広島国際大学・薬学部・准教授	大坪 忠宗	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
光スイッチ機能を持つ 蛍光分子の設計と合成	理学研究科・特任教授	入江 正浩	3. 物性に基づく機能を 有する分子・分子材料 の開発(物性・機能制御 グループ)

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



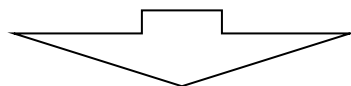
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・特任教授	未来分子研究センター・客員研究員	入江 正浩	3. 物性に基づく機能を 有する分子・分子材料 の開発(物性・機能制 御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理論設計支援による機 能分子触媒の開発	理学研究科・准教授	山中 正浩	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設計(設 計グループ)

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



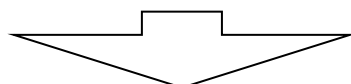
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・准教授	理学研究科・教授	山中 正浩	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設 計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
計算化学の先導的・実 証的応用計算	みずほ情報総研 (株)・チーフコンサル タント	福澤 薫	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設計(設 計グループ)

(変更の時期:平成 26 年 7 月 1 日)



新

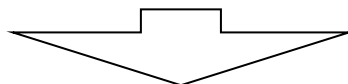
変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
みずほ情報総研 (株)・チーフコンサル タント	日本大学松戸歯学部科学 教室・助教	福澤 薫	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設 計(設計グループ)

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 28 年 4 月 1 日)



新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・助教	鈴木 望	2. 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

11 研究進捗状況(※ 5枚以内で作成)

(1) 研究プロジェクトの目的・意義及び計画の概要

化学の目的の一つは、分子の構造を様々に変えることでその性質を自在に制御し、新規な機能性を持った分子・分子材料を開発していくことにある。革新的な機能を持つ分子・分子材料を合目的的に創製するには、機能性の本質の理論化学的解析とそれに基づく「分子設計」、それを基とした「合成」と、構造・物性の「計測」、さらにその機能性の「評価」を行い、それを理論化学的解析にフィードバックするサイクルを確立する必要がある。本プロジェクトは、計算と実験が密接に連携することによりこのようなサイクルを確立し、分子技術研究のモデルとなる新たな研究拠点を未来分子研究センターに構築することを目指すものである。

本プロジェクトでは、計算による分子設計を担当する「設計グループ」と、実験的に機能分子の構築を行う「反応制御グループ」並びに「物性・機能制御グループ」を設け、これらのグループが互いに成果をフィードバックし合うことにより、機能分子・分子材料開発を行う。「設計グループ」では、機能分子の設計上必須となる複雑系の計算手法の開発を進めるとともに、機能性の本質の理論化学的解析およびそれに基づく機能分子の設計を行う。「反応制御グループ」は、反応性の制御が機能性発現の鍵となる物質、すなわち各種高機能触媒等の開発を担当する。「物性・機能制御グループ」は、物性の制御が機能性発現の鍵となる物質、すなわち光に応答して機能を発現する分子等の開発を担当する。実験グループによる合成分子の物性・構造の計測結果、および機能性の評価結果は「設計グループ」にフィードバックされ、さらなる理論的解析を経て分子の再設計を行う。本研究は学術的には化学の新たな方法論を与えるものであり、さらに得られる具体的成果は環境・エネルギー材料等様々な分野に革新的な進展をもたらすと期待される。

(2) 研究組織

本研究プロジェクトは、本学の専任教員 16 名、学外研究者 6 名、本学の大学院生(2013 年度 45 名、2014 年度 45 名、2015 年度 50 名)により遂行している。大学院生のうち、2013 年度は 2 名、2014 年度は 4 名、2015 年度は 6 名をリサーチアシスタントに採用した。研究代表者の枝元は、研究プロジェクトを総括するとともに自らもプロジェクトの一翼を担い、物性・機能制御グループにおいて研究を行った。各グループの相互連携を始めとする研究プロジェクトの円滑な推進のため、各研究グループよりグループリーダーを 1 名選出し、運営委員会を組織し、年数回運営委員会を開催した。運営委員会では、プロジェクトの進捗の評価ならびに調整を行い、さらに公開シンポジウム等の企画、定期刊行物の発刊、予算や人事等について審議した。本研究プロジェクトに参画する研究者は、設計グループ、反応制御グループ、物性・機能制御グループのいずれかに属し、各グループ間で互いに成果をフィードバックしつつ研究を進めている。また、会計担当の事務員 1 名と、その他プロジェクトの推進に関わる業務を担当する教育研究コーディネーター 1 名(本学の予算で雇用)が、研究支援に従事した。

(3) 研究施設・設備等

研究施設・装置・設備については、「17. 施設・装置・設備の整備状況」を参照のこと。本プロジェクトでは、既存の研究施設に加え、研究遂行上必須の研究設備(大規模サーバー、超伝導マグネット、迅速精密質量分析装置、顕微ラマン分光装置)を導入した。これらの装置は、それぞれ担当者が管理し、プロジェクト研究員の利用に供し、さらに研修を受けて使用許可を得た大学院生にも開放した。

(4) 進捗状況・研究成果等 ※下記、13及び14に対応する成果には下線及び*を付すこと。

< 現在までの進捗状況及び達成度 >

平成 25 年度

1. 設計グループ

各研究グループとの連携を開始するとともに、理論解析を効率的に実施するための環境整備・プログラム開発を行った。また、理論解析の効率化に向けて、プログラムの高速化・高機能化を行った。

(1-1)高精度量子化学計算における2電子積分の効率化に向け、コレスキー分解型3次摂動を開発しFMOプログラム ABINIT-MP への組み込みを実施した。さらに、FMOプログラム ABINIT-MPを「京」コンピュータの上に移植し、ライブラリとして提供した(論 54,58,118,120、学 301,302,386,414,503,526,527,542-544)。

(1-2)効率的に光学活性化化合物を提供する不斉有機分子触媒としてキラルリン酸触媒に着目し、イミンの不斉還元反応や臭素化反応を利用した不斉非対称化反応について反応機構から立体制御機構までを解明した(論 127-132)。

(1-3)光応答性分子を超高解像イメージングのためのバイオプローブとして利用するため、水溶化を目指して各種糖置換基を導入した新規ジアリールエテン分子を設計開発した(学 540)。

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

2. 反応制御グループ

設計グループとの連携を開始した。エネルギー変換触媒の開発では、構造変化をともなう酸化還元活性な白金錯体を理論計算により分子設計し(学 426,489)、流通式分離系による化学特性解析の研究では、逆相液体クロマトグラフィー系における分離挙動の理論計算による定量的な解析を行った(学 399,446)。

(2-1)理論設計支援による複合機能分子触媒開発では、ビスアミジン骨格を基盤とする機能複合化・複核化配位子を開発し、亜鉛試薬と組み合わせた不斉分子触媒が、 α -ケトエステルの不斉向山アルドール反応や α -ケトエステルの不斉アルキル化を促進することを見出した。

(2-2)自然界における化学物質の立体制御法を解明するため、テルペン化合物の設計と制御について検討を行った。中国産キク科 *Ligularia* 属植物の成分研究では、*L. anoleuca* と *L. fischeri* の産するテルペン化合物が互いに近いことを明らかにした(論 79)。

(2-3)固定型リガンド-基質分子間相互作用の平衡論・速度論的情報を得るため、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)による分子間相互作用の解析法を開発した。関連パラメータの実測法や推算法(論 141,142)、および解析基盤となるモーメント式を導出して実験操作法と解析手順を確立した(論 82、学 358,365,369,398)。

(2-4)効率的なエネルギー変換触媒の開発を目指し、配位子効果による錯体触媒の酸化還元電位の制御に成功した(学 458,493,514)。Ru-C 結合を有する単核ルテニウム錯体が、低過電圧で水の酸化を触媒することを見出した(学 264,280,443,491)。さらに、二核コバルト錯体が高選択的に酸素四電子還元反応を触媒することを解明した(論 140、学 427,428,490,492)。

(2-5)高周期16族元素を中心とする6価化合物の合成法の確立を行い、実験的探索合成を行った。4価16族元素化合物に対する酸化的ハロゲン化反応により6価化合物へと導くことが出来、系統的合成法の開発を行った(学 461)。

3. 物性・機能制御グループ

設計グループと連携のうえ、以下の研究を開始した。

(3-1)高機能光触媒の二次元 TiO₂ ナノシートの物性解明に向けて、ナノシートと格子の整合する Ag(110)上に、(1×1)TiO₂ 薄膜を合成する方法を確立した(学 432,448,450,456,464)。

(3-2)分子間水素結合を有するフォトクロミック分子結晶において不斉選択的光反応が進行すること(論 67)、ランタニド系金属錯体とフォトクロミック分子との配位結合を有する複合分子結晶が光照射により磁気物性を変化させることを見出した(論 96)。

(3-3)光スイッチ蛍光性を持つジアリールエテンについて、適切な置換基の導入により開環反応量子収率を向上させることに成功し、またジアリールエテンの開環反応量子収率が照射波長に依存することを明らかにした(論 94)。バイオプローブへの応用に向けて、ジアリールエテンに親水性置換基を導入することにより水溶化を行った(論 147)。

(3-4)電子アクセプター性分子であるアルキルビオロゲン誘導体を対イオンとしたテトラシアニド白金錯体の新規電荷移動塩を合成し、それらが発光することを見出した。単結晶 X 線構造解析により、本分子間電荷移動相互作用に基づく発光機構は構造自由度が大変高いことが明らかとなった。

(3-5)ポリ乳酸(PLA)の sc 化とアロイ化を同時に行うことで PLA の耐熱性と耐衝撃性の向上を達成し、また異種金属から成る層状複水酸化物を合成し、その熱分解温度(T_d)がポリプロピレン(PP)の T_d に近いほど PP に対する難燃効果が高いことを見出した(学 477,481)(特 4-6)。

平成 25 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 1)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 2)、ニュースレター(別紙資料 3)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。

平成 26 年度

1. 設計グループ

前年度までの結果を踏まえ、さらに各研究グループとの連携を強化し、理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能性の解析及び分子設計を推進した。

(1-1)引き続き FMO 計算の高速化、高機能化を行いながら、その応用計算として、界面、高分子、生体分子に関連した知的応答機能分子材料に対して、機能性の解析及び分子設計を行った。高分子の粗視化シミュレーションのための有効パラメータを FMO 計算から算定し、初期検討として実際にナフィオンなどを例にシミュレーションを実施した(学 213)。液体クロマトグラフィーの分離過程モデルの分子動力学計算を行い、水とメタノール溶媒での挙動の違いを理論的に解析した。流通式分離系による化学特性解析の研究では、チモール- β -シクロデキストリン間の会合エネルギーを定量的に解析し、この包接反応系における

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

分子認識の特徴を計算化学的に明らかにした(学 262,359)。

(1-2) 複合機能分子触媒や不斉分子触媒の機能解析を行い、合理的分子設計への足掛かりとした。不斉複核亜鉛触媒による不斉ヨードラクトン化反応(論 69)、キラルリン酸触媒やアミノ酸触媒によって達成される不斉反応について理論解析を行い、基質に応じて発現する機能性から立体制御機構までを理論的に解明した(論 64,65,67,68,127)。環状の三座配位子を有する白金(IV)錯体の電気化学的な検討に基づき、金属-配位子間の軌道相互作用について理論的な再解析を行った(論 10)。

(1-3) 設計に基づき、フォトクロミック分子に効率的な糖置換を導入することで、水溶性の向上に成功し(学 372)(特 1)、ウイルスの表面タンパク質等に対してバイオプローブとして応用した。

2. 反応制御グループ

前年度の設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、その結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(2-1) 金属-ビスアミジン触媒の開発を推進し、ルイス・ブレンステッド複合酸触媒が α -ケトエステルの不斉向山アルドール反応を、亜鉛三核触媒がニトロアルケン類とインドールの不斉 Friedel-Crafts 反応を促進することを見出した。

(2-2) *Ligularia* 属植物の成分研究では、*L. subspicata* におけるフラノエレモフィラン化合物の複雑な多様性の存在などを明らかにした(論 77)。ビスボラン化合物の合成では可能な4つの立体異性体をすべて合成し、立体構造が NMR で区別できることを示した(論 35)。

(2-3) 光学異性体クロマト分離系におけるキラル分離挙動を解析し、2-フェノキシプロピオン酸(R 体)と β -臭素化シクロデキストリン間の相互作用に関する会合速度定数および解離速度定数を定量的に求めた(論 37、学 261)。

(2-4) 水の酸化反応触媒に関する研究成果を本にまとめ(図書 3)、さらに水の酸化反応、および酸素還元反応において、錯体触媒の架橋配位子による反応速度の向上と反応選択性の制御に成功した(学 225-227,348-351)。

(2-5) 設計グループとの密接な連携により、糖置換基を導入して水溶性を向上したジアリールエテン誘導体を合成し(学 372)(特 1)、ウイルスの表面タンパク質等に対するバイオプローブとして応用した。

(2-6) 6価典型元素化合物を分子コアとする置換基の官能基修飾法を確立した。中性分子である6価 16 族元素上のハロゲン原子を一端引き抜き、カチオン種とした後に官能基化することで望む6価化合物へと変換できることが判った(学 429)。

3. 物性・機能制御グループ

前年度に引き続き、設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、その結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(3-1) Ag(110)上に作成した(1×1)TiO₂ 薄膜が、各種物性測定より二次元 TiO₂ ナノシートである可能性が高いことを見出した(学 233,256,268,296,299,377)。

(3-2) 水素結合ネットワークを有するフォトクロミック分子結晶について、光反応に伴う分子構造変化により水素結合に平行な結晶軸が可逆的に伸縮することを見出し、光駆動アクチュエーターの変形機構に関する重要な知見を得た。ジアリールエテンの反応点にペリレンを導入すること、もしくはスルホン化ジアリールエテンのエテン部位をジシアノエチレンで置換することで応答波長を長波長化し、可視光応答フォトクロミック分子の新しい設計指針を提示した(論 97)。

(3-3) 各種アルキルピオロゲン誘導体・テトラシアニド白金酸塩について発光量子収率、発光色の CIE 色度図座標の測定を行い、これらの物性値を明らかにした。ジヒドロピリジニウムイオンとヘキサシアニド鉄酸イオンで構成される新規電荷移動塩を合成し、酸蒸気による三色系のベイポクロミック現象を発見し、単結晶構造解析により色変化の原因である構造変化を明らかにした。

(3-4) 熱誘起相分離により sc-PLA から成る塊状多孔質体を生成し、sc 化により耐熱性に加え耐薬品性も著しく向上することを見出した。スーパーエンジニアリングプラスチックと PP をアロイ化することにより、PP の難燃化・耐熱化を達成するなどの成果を得た(特 7,9)。

平成 26 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 4)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 5)、ニュースレター(別紙資料 6)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。3月に外部評価委員会による外部評価(別紙資料 4)を受け、それを元に研究方針の再検討を行った。

平成 27 年度

1. 設計グループ

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

前年度までの結果を踏まえ、さらに各研究グループとの連携を強化し、理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能性の解析及び分子設計を推進した。

(1-1) 高速化、高機能化した FMO 法により、界面、高分子の反応性を解析した。

(1-2) 光駆動アクチュエーターの変形機構等につき、理論解析を行った。

(1-3) 複合機能分子触媒や不斉分子触媒の理論的検討に基づき、その高機能化を検討した。新規な分子触媒骨格として、柔軟な骨格を有する不斉分子触媒に着目し、位置選択的アシル化反応、不斉酸化反応について理論解析を行い、基質に誘導適合して発現する触媒機能について解明した(論 22,23)。現在は反応制御グループとの共同で、適合誘導型制御の一般性について解析を進めるとともに、高機能な分子触媒の設計指針の確立を目指して研究を推進している。

(1-4) 標的分子-タンパク質間相互作用解析により、各種受容体タンパク質から生体細胞まで幅広く利用可能な超高解像顕微鏡におけるフォトクロミック標識分子の設計開発を行った。

2. 反応制御グループ

さらに理論計算と実験の融合を深化させるべく、新たに設計グループとの共同で、二酸化炭素還元によるメタノール生成を目指したルテニウム-ルイス酸金属錯体の開発を開始した。また高周期元素を含む芳香族性化合物に関する理論予測とそれに基づく分子設計の知見を得た。天然物に関しては、*L. hodgsonii* が日本産と中国産で異なるのみならず、中国産もさらに2つのケモタイプに分けられることなどを明らかにした(論 31)。

(2-1) 金属-ビスアミン触媒の開発を推進し、 α -ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応や不斉アルキニル化反応の開発を開始した。

(2-2) 非固定型の遊離リガンド-基質分子間相互作用の平衡論的および速度論的情報を得るための解析法を開発した。特に、キャピラリー電気泳動を利用するリガンド非固定型の分子間相互作用解析法を開発した(学 208,209,211)(特 3)。

(2-3) 水の酸化反応を触媒する二核ルテニウム錯体の金属間距離と反応キャビティの親水性を制御することにより、反応速度が向上することを見出した。

(2-4) 超高解像顕微鏡(PALM/STORM)に応用可能な、フォトクロミック標識分子の開発を開始した。

(2-5) 6価典型元素化合物をオクタヘドラル空間の制御分子として用いて、機能性発現のためのデザイン合成を行った。また種々の酸化状態を有する 16 族元素化合物の自在制御合成に関する知見を得た(論 85,86、学 367,462,463,536,537)。

3. 物性・機能制御グループ

前年度に引き続き、設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、特に高分子材料の物性測定の結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(3-1) Ag(110)上に作成した(1×1)TiO₂ 薄膜の電子状態について、角度分解光電子分光測定を行い、二次元電子状態を求めることに成功した。

(3-2) フォトクロミック分子結晶の光誘起変形を解析し、光異性化反応に伴う分子の構造変化がマクロスケールの結晶外形変化を誘起することを明らかにし、光照射により自重の 1900 倍の物体を持ち上げるなど、光駆動アクチュエーターとして優れた機能を発現することを見出した(論 43)。

(3-3) アルキルピオロゲン誘導体・テトラシアニド白金酸塩が、湿度に応じてその発光色を変えることを発見した。各種物性測定の結果から、結晶水の数が大きく発光特性を変えることを明らかにした。

(3-4) ポリ乳酸(PLA)の可塑性により分子運動を容易にし、それが分子間相互作用による sc 化と異種高分子間界面反応のアロイ化に与える影響について検討した。また分解促進剤を含む PLA 塊状多孔質体を熱誘起相分離法にて創出し、PLA 多孔質体の分解速度を制御した(特 12)。

平成 27 年度の成果をまとめて公開シンポジウムを実施し、さらに成果報告書、ニュースレターを刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。

<特に優れた研究成果>

本プロジェクトの進展により、特に「光に応答する分子」の開発が大きく進展し、入江正浩による“The Porter Medal”の受賞(別紙資料 7)につながった。その他、受賞等につながった重要な成果については、「14 その他の研究成果等」にまとめた。

<問題点とその克服方法>

「設計グループ」においては、本プロジェクト遂行上必要な大規模なプログラム(ABINIT-MP)の研究開発を

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

続けている。しかし、そのための研究費が現状では十分とは言えず、今後より多角的な外部資金の取得を予定している。

「反応制御グループ」においては、異種金属を含む二核錯体の構築により高機能触媒の開発を目指しているが、この場合金属種の組合せの多さと合成の困難さから、スクリーニングの手法で触媒探索することが難しい。この点につき、設計グループ(山中正浩)と密接に共同して計算化学による機能予測をしたうえで、合成する触媒を検討している。

「物性・機能制御グループ」においては、質の良い二酸化チタン薄膜を合成するために、超高真空槽にかなりの圧力の酸素を導入する必要があり、測定系への悪影響が懸念された。試料準備槽を整備してそこで薄膜調整を行うことにより、測定系への酸素導入の影響を回避した。

<研究成果の副次的効果(実用化や特許の申請など研究成果の活用の見直しを含む。)>

本プロジェクトの進捗に伴い、大規模計算システムや光スイッチ蛍光分子、高機能高分子材料等について実用化の見通しが得られ、特許出願が行われている。(「14 その他の研究成果等」参照)

<今後の研究方針>

3グループの連携を進め、「設計」「合成」「計測」「評価」のサイクルによる物質開発を更に進める。

「設計グループ」では、京等のハイパフォーマンスコンピューター利用を見据えての更なる大規模FMO計算法の開発を行い、高機能触媒、外部刺激に応答する分子等の機能解析と設計を進める。蛍光スイッチ分子のバイオイメージングの実用化に向けた理論設計を行う。

「反応制御グループ」では、設計グループと連携して高機能触媒による多成分連結反応による有用物質の効率的合成法の開拓や、太陽光による水の完全分解を目指した酸化還元触媒の開発等を行う。バイオイメージングの実用化を可能とする蛍光スイッチ分子を合成する。

「物性・機能制御グループ」では、設計グループと連携して、磁性や誘電性の光スイッチ機能を持つ結晶の開発、電荷移動相互作用に基づく発光性金属錯体の合成、低次元化により高機能化した光触媒の開発等を進める。

<今後期待される研究成果>

FMO 計算の大規模化が達成され、それにより複雑系の機能解析、材料設計が進展すると期待される。それに伴い、水溶性光スイッチ蛍光分子の開発が進展すると期待される。これは超高解像顕微鏡の開発につながるるとともに、特にバイオイメージングの革新的進展をもたらすと考えられる。他にも、光による水の完全分解を触媒する錯体や、高機能触媒による多成分連結反応による有用物質の効率的合成法等の開発が進展しており、これらの成果は将来的に技術移転等を通じて社会への大きな貢献が期待される。

<自己評価の実施結果及び対応状況>

毎年行う学内の全研究員(本学の専任教員)による「成果報告会」、および年度末の運営委員会において自己評価を実施した。その結果、100 報を超える論文、13 件の特許出願が出るなど、ほぼ投入した費用に見合った成果が上がっていると判断している。研究成果がさらに最大となるような予算配分についても検討を行い、その結果、平成27年度は構造解析の先鋭化が必要との認識に基づいた予算配分を行った。また、「設計」と「合成」の密接な連携をより強化し、さらに広範な分野での計算を実施するためには、設計グループの人的強化が必要と判断し、平成28年度から設計グループに2名のPDを配置することとした。

<外部(第三者)評価の実施結果及び対応状況>

本プロジェクトの外部評価を行うため、永瀬 茂(京都大学・福井謙一記念研究センター・シニアリサーチフェロー)、塩谷光彦(東京大学大学院理学研究科化学専攻・教授)、時任宣博(京都大学化学研究所・所長)の3名から成る外部評価委員会を組織し、平成27年3月に外部評価を実施した。その結果、概ね順調にプロジェクトが進展しているとの評価を得た。その際、各グループの連携をさらに強化するよう指摘があり、高機能触媒としての二核錯体の開発に設計グループがスクリーニングの手法でバックアップするなど、さらに連携を強めるとともに、上記<自己評価>で記した判断のもとに設計グループにPD2名を配するよう研究費を配分した。

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

12 キーワード(当該研究内容をよく表していると思われるものを8項目以内で記載してください。)

- (1) 分子技術 (2) 光スイッチ機能蛍光分子 (3) 不斉合成触媒
 (4) FMO 分子軌道法 (5) 光駆動分子アクチュエーター (6) 水の光分解触媒
 (7) 機能性金属錯体 (8) バイオプローブ

13 研究発表の状況(研究論文等公表状況。印刷中も含む。)

上記、11(4)に記載した研究成果に対応するものには*を付すこと。

<雑誌論文>

No	査読	著書名	論文表題	雑誌名	発行年	ページ
1.	※	Momiyama, N.; Funayama, K.; Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akasaka, N.; Ishida, S.; Iwamoto, T.; Terada, M.	Hydrogen Bonds-Enabled Design of a C ₁ -Symmetric Chiral Brønsted Acid Catalyst (DOI: 10.1021/acscatal.5b02079)	ACS Catalysis (6)	2016	949-956
2.	※	Kato, M.; Yasui, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	Synthesis of (+)- <i>trans</i> -Dihydrolycoricidine by an Organocatalytic Enantioselective Friedel-Crafts Reaction (DOI: 10.1002/ajoc.201500469)	Asian J. Org. Chem.	2016	in press
3.	※	Ishizuka, T.; Watanabe, A.; Kotani, H.; Hong, D.; Satonaka, K.; <u>Wada, T.</u> ; Shiota, Y.; Yoshizawa, K.; Ohara, K.; Yamaguchi, K.; Kato, K.; Fukuzumi, S.; Kojima, T.	Homogeneous Photocatalytic Water Oxidation with a Dinuclear CoIII-Pyridylmethylamine Complex (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b02336)	Inorg. Chem. (55)	2016	1154- 1164
4.	※	<u>Miyabe, K.</u>	Moment Theory for Kinetic Study of Chromatography (DOI: 10.1016/j.trac.2016.01.003)	Trends in Anal. Chem.	2016	in press

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

5.	※	Satoh T.; Matano Y.; <u>Minoura M.</u> ; Nakano H.; Furukawa K.	Redox-Switchable 20 π -, 19 π -, and 18 π -Electron 5,10,15,20-Tetraaryl-5,15-diazaporp hyrin -oid Nickel(II) Complexes (DOI: 10.1002/anie.201510734)	Angew. Chem. Int. Ed. (55)	2016	2235- 2238
6.	※	Murai, T.; Maekawa, Y. ; Hirai, Y. ; Kuwabara, K. ; <u>Minoura, M.</u>	Phosphonoselenoic acid esters from the reaction between phosphoroselenoyl chlorides and Grignard reagents: synthetic and stereochemical aspects (DOI: 10.1039/C6RA00318D)	RSC Adv. (6)	2016	15180- 15183
7.	※	Ichikawa, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie M.</u>	Photochromism of diarylethene derivatives having benzophosphole and benzothiophene groups (DOI: 10.1016/j.dyepig.2015.11.023)	Dyes Pigm. (126)	2016	186-193
8.	※	Chen, W.; Zhang, Q.; <u>Uetani, K.</u> ; Li, Q.; Lu, P.; Cao, J.; Wang, Q.; Liu, Y.; Li, J.; Quan, Z.; Zhang, Y.; Wang, S.; Meng, Z.; Yu, H.	Sustainable Carbon Aerogels Derived from Nanofibrillated Cellulose as High-performance Absorption Materials (DOI: 10.1002/admi.201600004)	Adv. Mater. Interfaces	2016	accepted
9.	※	坂口正貴, <u>望月祐志</u> , 渡邊千鶴, <u>福澤薫</u>	赤色蛍光タンパク質 DsRed の色 素部周辺における水分子ならびに 隣接アミノ酸残基の構造の励起エ ネルギーへの影響評価 (DOI:10.2477/jccj.2015-0033)	J. Comp. Chem. Jpn. (14)	2015	155-163
10.	※	<u>Wada, T.</u> ; Enami, K.; Kojima, R.; Okada, T.; Ishikawa, Y.; Miyazato, Y.; <u>Horn, E.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	<u>Reversible structural change</u> <u>accompanying two-electron redox</u> <u>reaction of Pt(tacn) (tacn=</u> <u>1,4,7-triazacyclononane)</u> <u>complexes(* 論 10)</u>	Bull. Chem. Soc. Jpn. (88)	2015	1230- 1237

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

11.	※	Kato, K.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Modeling of hydroxyapatite-peptide interaction based on fragment molecular orbital method (DOI:10.1016/j.cplett.2015.03.057)	Chem. Phys. Lett. (629)	2015	58-64
12.	※	Fujiwara, T.; Mori, H.; <u>Komeiji, Y.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics study on hydrated Ln(III) ions (DOI:10.7566/JPSCP.5.011001)	JPS-Conf. Ser. (5)	2015	011001-1-8
13.	※	Ando, H.; Shigeta, Y.; Baba, T.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Nakano, M.	Hydration effects on enzyme-substrate complex of nylon oligomer hydrolase: inter-fragment interaction energy study by the fragment molecular orbital method (DOI:10.1080/00268976.2014.941311)	Mol. Phys. (113)	2015	319-326
14.	※	<u>Fukuzawa, K.</u> ; Kurisaki, I.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Tanaka, S.; <u>Komeiji, Y.</u>	Explicit solvation modulates intra- and inter-molecular interactions within DNA: electronic aspects revealed by the ab initio fragment molecular orbital (FMO) method (DOI: 10.1016/j.comptc.2014.11.020)	Comput. Theor. Chem. (1054)	2015	29-37
15.	※	Watarai, Y.; Ishizawa, M.; Ikura, T.; Zacconi, FC; Uno, S.; Ito, N.; Mourino, A.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Makishima, M.; Yamada, S.	Synthesis, Biological Activities and X-ray Crystal Structural Analysis of 25-Hydroxy-25(or 26)-adamantyl-17-[20(22),23-diyanyl]-21-norvitamin D Compounds (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00792)	J. Med. Chem. 58(24)	2015	9510-9521
16.	※	Suhara, Y.; Hirota, Y.; Hanada, N.; Nishina, S.; Eguchi, S.; Sakane, R.; Nakagawa, K.; Wada, A.; Takahashi, K.; <u>Tokiwa, H.</u>	Synthetic Small Molecules Derived from Natural Vitamin K Homo-logues that Induce Selective Neuronal Differentiation of Neuronal Progenitor Cells (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00999)	J. Med. Chem. 58(17)	2015	9510-9521

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Okan T.;				
17.	※	Nakano, S.; Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Kawahara, N.; Komeda, H.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y.	Structural and computational analysis of peptide recognition mechanism of class-C type penicillin binding protein, alkaline D-peptidase from Bacillus cereus DF4-B (DOI: 10.1038/srep13836)	Sci. Rep. (5)	2015	13836
18.	※	<u>Tokiwa, H.</u>	Possibility of New Medicinal Chemistry Based on "Wet-Dry" Interfaced Pharmaceutical Category (DOI: 10.1248/yakushi.15-00175-F)	Yakugakuzas shi 135(9)	2015	1001-1002
19.	※	Onoda, K.; Sawada, H.; Morita, D.; Fujii, K.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kuroda, T.; Miyachi, H.	Anti-MRSA activity of isoplagiochin-type macrocyclic bis(bibenzyl)s is mediated through cell membrane damage (DOI:10.1016/j.bmc.2015.04.047)	Bio. Med. Chem. 23(13)	2015	3309-3316
20.	※	Fukushima, K.; Takahashi, T.; Ueyama, H.; Takaguchi, M.; Ito, S.; Oishi, K.; Minami, A.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Takimoto, T.; Suzuki, T.	Amino acid substitutions contributing to α 2,6-sialic acid linkage binding specificity of human parainfluenza virus type 3 hemagglutinin-neuraminidase (DOI: 10.1016/j.febslet.2015.03.036)	FEBS Lett. 589(11)	2015	1278-1282
21.	※	Kawata, K.; Morishita, K.; Yamada, S.; Nakayama, M.; Kobayashi, T.; Furusawa, Y.; Arimoto- Kobayashi, S.; Oohashi, T.; Makishima, M.; Naitou, H.;	RXR Partial Agonist Produced by Side-Chain Repositioning of Alkoxy RXR Full Agonist Retains Anti-type 2 Diabetes Activity without the Adverse Effects (DOI: 10.1021/jm501863r)	J. Med. Chem. 58(2)	2015	912-926

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Tai, A.; Kakuta, K.				
22.	※	Odagi, M.; Furukori, K.; Yamamoto, Y.; Sato, M.; Iida, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	<u>Origin of Stereocontrol in Guanidine-Bisurea Bifunctional Organocatalyst That Promotes α-Hydroxylation of Tetralone-Derived β-Ketoesters: Asymmetric Synthesis of β- and γ-Substituted Tetralone Derivatives via Organocatalytic Oxidative Kinetic Resolution (* 論 22)</u> (DOI: 10.1021/ja511149y)	J. Am. Chem. Soc. (137)	2015	1909-1915
23.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Yoshida, U.; Sato, M.; Shigeta, T.; Yoshida, K.; Furuta, T.; Kawabata, T.	<u>Origin of High <i>E</i>-Selectivity in 4-Pyrrolidinopyridine-Catalyzed Tetrasubstituted α,α'-Alkenediol: A Computational and Experimental Study(* 論 23)</u> (DOI: 10.1021/jo5029453)	J. Org. Chem. (80)	2015	3075-3082
24.	※	Zhu, C.; Saito, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	Benzothiazoline: Versatile Hydrogen Donor for Organocatalytic Transfer Hydrogenation (DOI: 10.1021/ar500414x)	Acc. Chem. Res. (48)	2015	388-398
25.	※	Arai, T.; Ogawa, H.; Awata, A.; Sato, M.; Watabe, M.; <u>Yamanaka, M.</u>	PyBidine-Cu(OTf) ₂ -Catalyzed Asymmetric [3+2] Cycloaddition with Imino Esters: Harmony of Cu-Lewis Acid and Imidazolidine-NH Hydrogen Bonding in Concerto Catalysis (DOI: 10.1002/anie.201410782)	Angew. Chem. Int. Ed. (54)	2015	1595-1599
26.	※	Odagi, M.; Takayama, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	Development of Guanidine-Bisurea Bifunctional Organocatalysts with a Chiral Pyrrolidine Moiety and Application to α -Hydroxylation of Tetralone-Derived β -Keto Esters (DOI: 10.3390/molecules200712590)	Molecules (20)	2015	12590-12598
27.	※	Arai, T.; Watanabe, O.; Yabe, S.;	Catalytic Asymmetric Iodocyclization of N-Tosyl Alkenamides using	Angew. Chem. Int. Ed.	2015	12767-12771

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		<u>Yamanaka, M.</u>	Aminoiminophenoxy Copper Carboxylate: A Concise Synthesis of Chiral 8-Oxa-6-Azabicyclo[3.2.1]octanes (DOI: 10.1002/anie.201505748)	(54)		
28.	※	Kato, M.; Hirao, S.; Nakano, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sohtome, Y.; Nagasawa, K.	Entropy-Driven 1,2-Type Friedel-Crafts Reaction of Phenols with <i>N-tert</i> -Butoxycarbonyl Aldimines (DOI: 10.1002/chem.201503280.)	Chem. Eur. J. (21)	2015	18606-18612
29.	※	Shimizu, A.; Inoue, K.; Ichihara, M.; Hanai, R.; Saito, Y.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemotypes of <i>Ligularia vellerea</i> , its hybrids, and <i>L. melanothyrsa</i>	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	9-12
30.	※	Shirai, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Kawahara, T.; Gong, X.; Noyama, T.; Watanabe, E.; <u>Kuroda, C.</u>	Diversity in the Flavonoid Composition of <i>Stellera chamaejasme</i> in the Hengduan Mountains	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	53-56
31.	※	<u>Kuroda, C.</u> ; Inagaki, K.; Chao, X.; Inoue, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Hanai, R.	Chemical and Genetic Diversity of <i>Ligularia hodgsonii</i> in China (* 論 31)	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	823-826
32.	※	Taniguchi, M.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Constituents of <i>Ligularia brassicoides</i> Collected in China: A New Diels-Alder Adduct of Eremophilan-10 β -ol and Methacrylic Acid	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	827-830

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Tori, M.				
33.	※	Saito, Y.; Otsubo, T.; Iwamoto, Y.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Four New Sesquiterpenoids from <i>Ligularia subspicata</i> Collected in China; Isolation of a Bakkane-type Lactone, an Eremophilane-type Lactone, and Two Ortho Esters	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	831-833
34.	※	Otomo, I.; <u>Kuroda, C.</u>	Effect of the Position of Reaction-site in Amphipathic-Type Thioester in Aqueous Amidation Reaction (DOI: org/10.4236/aces.2015.53032)	Adv. Chem. Eng. Sci. (5)	2015	311-316
35.	※	Hirai, M.; Miyazaki, R.; Mitsui, K.; Kiuchi, K.; Onuki, H.; Hirota, H.; <u>Kuroda, C.</u>	<u>Synthesis and NMR Spectroscopic Elucidation of Four Diastereoisomers of Oxygenated Bisabolane Side Chain</u> (* 論 35) (DOI: 10.1002/hlca.201400395)	Helv. Chim. Acta (98)	2015	1035-1060
36.	※	Saito, Y.; Iga, S.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Terpenoids from <i>Ligularia virgaurea</i> collected in China: the first example of two bakkane derivative with an anhydride-type ring C and nineteen new chemical constituents (DOI: 10.1016/j.tet.2015.09.011)	Tetrahedron (71)	2015	8428-8435
37.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Kamiya, S.	<u>Kinetic Study of Intermolecular Interaction between 2-Phenoxypropionic Acid and β-Bromo-cyclodextrin Affixed on Stationary Phase by Liquid Chromatography</u> (* 論 37)	Anal. Sci. (31)	2015	743-749
38.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Takahashi, R.; Shimazaki, Y.	Kinetic Study of Interaction between Solute Molecule and Surfactant Micelle (DOI: 10.2116/analsci.31.1019)	Anal. Sci. (31)	2015	1019-1025
39.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y.	Moment Analysis of Affinity kinetics in Inclusion Complex System between Thymol and	Bull. Chem. Soc. Jpn. (88)	2015	1603-1611

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			Sulfated- β -cyclodextrin by Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE) (DOI: 10.1246/bcsj.20150203)			
40.	※	Saito, M.; Nakada, M.; Kuwabara, T.; <u>Minoura, M.</u>	A reversible two-electron redox system involving a divalent lead species (DOI: 10.1039/C4CC09856K)	Chem. Commun. (51)	2015	4674-4676
41.	※	Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.; <u>Edamoto, K.</u> ; Matsunami, M.; Hajiri, T.; Kimura, S.	Electronic structure of Ni ₂ P(0001) studied by resonant photoelectron spectroscopy (DOI: 10.1380/ejsnt.2015.93)	e-J. Surf. Sci. Nanotech. (13)	2015	93-98
42.	※	Sumi, T.; Kaburagi, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Une, K.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	Fluorescent photochromic diarylethene that turns on with visible light (DOI: 10.1021/acs.orglett.5b02361)	Org. Lett. (17)	2015	4802-4805
43.	※	Ohshima, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Light-driven bending of diarylethene mixed crystals</u> (* 論 43) (DOI: 10.1039/C5SC01994J)	Chem. Sci. (6)	2015	5746-5752
44.	※	<u>Matsushita, N.</u>	Redetermination of the crystal structure of <i>catena</i> -poly[[[bis(ethylenediamine)-platinum(II)]- μ -iodido-[bis(ethylenediamine)platinum(IV)]- μ -iodido] tetrakis(octane-1-sulfonate) dihydrate] (DOI: 10.1107/S2056989015016801)	Acta Cryst. Sect. E (E72)	2015	1155-1158
45.	※	<u>Matsushita, N.</u> ; Taira, A.	“A one-dimensional chloride-bridged Pt ^{II} /Pt ^{IV} mixed-valence complex with a 4-[(4-hydroxyphenyl)diazenyl]benzenesulfonate counter-ion (DOI: 10.1107/S2053229615019877)	Acta Cryst. Sect. C (C72)	2015	1033-1036

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

46.	※	Kodama, R.; Sumaru, K.; Morishita, K.; Kanamori, T.; Hyodo, K.; Kamitanaka, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	A diarylethene as the SO ₂ gas generator upon UV irradiation (DOI: 10.1039/C4CC07790C)	Chem. Commun. (51)	2015	1736-1738
47.	※	Uetani, K.; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Thermal conductive properties of nonwoven nanocellulose sheets (DOI: 10.1021/acs.biomac.5b00617)	Biomacromolecules (16)	2015	535-549
48.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Abe, S.	Stereocomplex poly(lactic acid) alloys with superb heat resistance and toughness (DOI: 10.1021/acssuschemeng.5b00832)	ACS Sustainable Chem. Eng. (3)	2015	3245-3252
49.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Crystallite Size Effect on Thermal Conductive Properties of Nonwoven Nanocellulose Sheets (DOI: 10.1021/acs.biomac.5b00617)	Biomacromolecules (16)	2015	2220-2227
50.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Kawano, Y.; Mori, K.; Wakabayashi, N.	Correlations between photovoltaic characteristics, adsorption number, and regeneration kinetics in dye-sensitized solar cells revealed by scanning photocurrent microscopy (DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b01581)	Langmuir (31)	2015	7158-7165
51.	※	Yamamoto, J.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Optimal damping algorithm for unrestricted Hartree-Fock calculations (DOI: 10.1273/cbij.14.14)	Chem-Bio Informatics J. (14)	2014	14-33
52.	※	Kato, Y.; Fujiwara, T.; <u>Komeiji, Y.</u> ; Nakano, T.; Mori, H.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics (FMO-MD) simulations on hydrated Cu(II) ion (DOI: 10.1273/cbij.14.1)	Chem-Bio Informatics J. (14)	2014	1-13
53.	※	Anzaki, S.;	Interaction energy analysis on	J. Mol.	2014	48-58

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Tanaka, S.	specific binding of influenza virushemagglutinin to avian and human sialosaccharide receptors: Importance of mutation-induced structural change (DOI: 10.1016/j.jmgm.2014.07.004)	Graph. Model. (53)		
54.	※	Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Komeiji, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u>	<u>Electron-correlated</u> <u>fragment-molecular-orbital</u> <u>calculations for biomolecular and</u> <u>nano systems</u> (* 論 54) (DOI: 10.1039/c4cp00316k)	Phys. Chem. Chem. Phys. (16)	2014	10310- 10344
55.	※	<u>Fukuzawa K.</u> ; Watanabe C.; Kurisaki I.; Taguchi N.; <u>Mochizuki Y.</u> ; Nakano T.; Tanaka S.; <u>Komeiji Y.</u>	Accuracy of the fragment molecular orbital (FMO) calculations for DNA: Total energy, molecular orbital, and inter-fragment interaction energy (DOI: 10.1016/j.comptc.2014.02.002)	Comp. Theor. Chem. (1034)	2014	7-16
56.	※	Saitow M.; Ida T.; <u>Mochizuki Y.</u>	Improved description of the orbital relaxation effect by practical use of the self-energy (DOI: 10.1002/qua.24625)	Intern. J. Quant. Chem.(114)	2014	577- 586
57.	※	甘利真司, <u>望月祐志</u> , 加藤昭史, <u>福澤薫</u> , 渡邊千鶴, 沖山佳生, 田中成典, 中野達也	フラグメント分子軌道法を用いた spin-component-scaled MP2 法に基 づくタンパクーリガンド相互作用クラ スター解析	CBI 学会誌 2 巻 4 号	2014	17-25
58.	※	Tanaka S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Komeiji, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u>	<u>Electron-correlated</u> <u>fragment-molecular-orbital</u> <u>calculations for biomolecular and</u> <u>nano systems</u> (* 論 58) (DOI: 10.1039/C4CP00316K)	Phys. Chem. Chem. Phys. (16)	2014	10310- 10344
59.	※	Nakano S.; Okazaki S.; <u>Tokiwa H.</u> ; Asano Y.	Binding of NAD ⁺ and L-threonine induces stepwise structural and flexibility changes in Cupriavidus necator L-threonine dehydrogenase (DOI: 10.1074/jbc.M113.540773)	J. Bio. Chem. (289)	2014	10445- 10454

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

60.	※	Abe, T.; Sando, A.; Teraoka, F; <u>Otsubo, T.</u> ; Morita, K; <u>Tokiwa, H.</u> ; <u>Ikedo, K.</u> ; Suzuki, T.; Hidari, K. IPJ	Computational design of a sulfoglucuronide derivative fitting into a hydrophobic pocket of dengue virus E protein (DOI:10.1016/j.bbrc.2014.04.122)	Biochem. Biophys. Res. Comm. 449(1)	2014	32-37
61.	※	Kudo ,T.; Ishizawa, M.; Maekawa, K.; Nakabayashi, M.; Watarai, Y.; Uchida, H.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Ikura, T.; Ito, N.; Makishima, M.; Yamada, S.	Combination of Triple Bond and Adamantane Ring on the Vitamin D Side Chain Produced Partial Agonists for Vitamin D Receptor (DOI:10.1021/jm401989c)	J. Med. Chem. 57(10)	2014	4073- 4087
62.	※	Tanaka, T.; Gamo, K.; Oyama, T.; Ohashi, M.; Waki, M.; Matsuno, K.; Matsuura, N.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Miyachi, H.	Molecular dynamics study-guided identification of cyclic amine structures as novel hydrophobic tail components of hPPAR γ agonists (DOI:10.1016/j.bmcl.2014.06.023)	Bioorg. Med. Chem. Lett. 24(16)	2014	4001- 4006
63.	※	Ikawa, T.; Kaneko, H.; Masuda, S.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Akai, S.	Trifluoromethanesulfonyloxy-Group- Directed Regioselective (3+2) Cycloadditions of Benzyne for the Synthesis of Functionalized Benzo-Fused Heterocycles (DOI: 10.1039/C4OB01627K)	Org. Biomol. Chem. (13)	2014	520-526
64.	※	Kanomata, K.; Toda, Y.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; <u>Tsuzuki, S.</u> ; Gridneva, I. D.; Terada, M.	<u>Secondary stereocontrolling</u> <u>interactions in chiral Bronsted acid</u> <u>catalysis: study of a</u> <u>Petasis-Ferrier-type rearrangement</u> <u>catalyzed by chiral phosphoric</u> <u>acids(* 論 64)</u> (DOI: 10.1039/C4SC00611A)	Chem. Sci. (5)	2014	3515- 3523

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

65.	※	Yoshida, M.; Kubara, A.; Nagasawa, Y.; Hara, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Asymmetric Michael Addition of β-Ketoesters to Enones Catalyzed by the Lithium Salt of a Primary β-Amino Acid</u> (* 論 65) (DOI:10.1002/ajoc.201400024)	Asian J. Org. Chem. (4)	2014	523-529
66.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Morishima, M.; Shibata, Y.; Higashibayashi, S.; Sakurai, H.	DFT Studies of Mechanism and Origin of Stereoselectivity of Palladium-Catalyzed Cyclotrimerization Reactions Affording <i>syn</i> -Tris(norborneno)benzenes (DOI: 10.1021/om500322b)	Organo-Metallic (33)	2014	3060-3068
67.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Shibata, Y.	<u>Theoretical Studies on Mechanisms and Origins of Stereocontrol in Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Reactions</u> (* 論 67) (DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.72.580)	J. Syn. Org. Chem. (72)	2014	580-595
68.	※	Saito, K.; Horiguchi, K.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Chiral Phosphoric-Acid-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ethyl Ketimine Derivatives by Using Benzothiazoline</u> (* 論 68) (DOI:10.1002/chem.201402763)	Chem. Eur. J. (20)	2014	7616-7620
69.	※	Arai, T.; Sugiyama, N.; Masu, H.; Kado, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Trinuclear $Zn_3(OAc)_4$-3,3'-bis(aminoimino)binaphthoxide Complex for Highly Efficient Catalytic Asymmetric Iodolactonization</u> (* 論 69) (DOI:10.1039/C4CC02415J)	Chem. Comm. (50)	2014	8287-8290
70.	※	Mori, K.; Kurihara, K.; Yabe, S.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	Double C(sp ³)-H Bond Functionalization Mediated by Sequential Hydride Shift/Cyclization Process: Diastereoselective Construction of Polyheterocycles (DOI:10.1021/ja412706d)	J. Am. Chem. Soc. (136)	2014	3744-3747
71.	※	Yu J.; <u>Kuroda, C.</u> ; Gong, X.	Natural Hybridization and Introgression between <i>Ligularia cymbulifera</i> and <i>L. tongolensis</i> (Asteraceae, Senecioneae) in Four Different Locations (DOI: 10.1371/journal.pone.0115167)	Plos One	2014	e115167

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

72.	※	Saito, Y.; Sasaki, Y.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Structures of Six New Compounds from <i>Ligularia brassicoides</i> (DOI:10.1016/j.tet.2014.10.003)	Tetrahedron (70)	2014	9726-9730
73.	※	Saito, Y.; Ichihara, M.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Twelve new compounds from <i>Ligularia melanothyrsa</i> ; isolation of melanothyrsins A-E, normelanothyrsin A, and other eremophilane sesquiterpenoids (DOI: 10.1016/j.tet.2014.02.080)	Tetrahedron (70)	2014	2621-2628
74.	※	Saito, Y.; Mukai, T.; Iwamoto, Y.; Baba, M.; Takiguchi, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kawahara, T.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Germacranolides and their diversity of <i>Eupatorium heterophyllum</i> collected in China (DOI: org/10.1248/cpb.c14-00426)	Chem. Pharm. Bull. (62)	2014	1092-1099
75.	※	Saito, Y.; Kamada, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Isolation and structure of three bislactones, eremopetasitenin B4, eremofarfugins F, and G, from <i>Ligularia przewalskii</i> and revision of the structure of an epoxy-lactone isolated from <i>Ligularia intermedia</i> (DOI: 10.1246/cl.140745)	Chem. Lett. (43)	2014	1740-1742
76.	※	Saito, Y.; Sasaki, Y.; Komiyama, T.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Structure and Cytotoxic Evaluation of 12-Oxygenated Eremophilanes from <i>Ligularia lingiana</i> (DOI: 10.1016/j.tet.2014.06.030)	Tetrahedron (40)	2014	5878-5883
77.	※	Shimizu, A.; Watanabe, S.; Hanai, R.; Okamoto, Y.;	<u>Chemical and Genetic Study on Hybrid of <i>Ligularia subspicata</i> and <i>L. cyathiceps</i> Collected in Yunnan Province of China</u> (* 論 77)	Chem. Biodiversity (11)	2014	1438-1448

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	(DOI: 10.1002/cbdv.201400133)			
78.	※	黒田智明, 花井亮, 通元夫, 岡本育子, 齋藤義紀, 永野肇, 大崎愛弓, 廣田洋, 河原孝行, 龔洵	中国横断山脈地域に生育するキク科 <i>Ligularia</i> 属植物の生産するフラノエレモフィラン化合物の多様性 (DOI: org/10.5059/yukigoseikyokaishi.72.717)	有機合成化学協会誌 (72)	2014	717-725
79.	※	Shimizu, A.; Suzuki, Y.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	<u>Chemical and genetic similarity and diversity of <i>Ligularia anoleuca</i> and <i>L. fischeri</i> collected in the Hengduan Mountains of China</u> (* 論 79) (DOI: 10.1016/j.phytochem.2014.03.019)	Phyto-Chemistry (102)	2014	137-144
80.	※	Hirota, H.; Horiguchi, Y.; Kawaii, S.; Hanai, R.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	The First Isolation of Furanoeremophilane from <i>Ligularia nelumbifolia</i>	Nat. Prod. Commun. (40)	2014	325-327
81.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Murata, Y.	Moment Analysis of Chromatographic Behavior of Separation Media for Fast HPLC (DOI: 10.2116/analsci.30.277)	Anal. Sci (30)	2014	277-283
82.	※	<u>Miyabe, K.</u>	<u>Moment Equations for Chromatography Based on Langmuir Type Reaction Kinetics</u> (* 論 82) (DOI: 10.1016/j.chrom.2014.06.052)	J. Chromatogr. A (1356)	2014	171-179
83.	※	Murai, T.; Hayashi, T.; Yamada, K.; Maekawa, Y.; <u>Minoura, M.</u>	Fluorinative hydrolysis of phosphorothioic acid esters with a binaphthyl group through axis-to-center chirality transfer leading to the formation of P-chiral phosphorothioic monofluoridic acid salts (DOI:10.1039/C4CC05198J)	Chem. Commun. (50)	2014	12473-12475
84.	※	Kuwabara, T.; Guo, J.-D.; Nagase, S.;	Enhancement of stannylene character in stannole dianion equivalents evidenced by NMR and Mossbauer	Organo-Metallic (33)	2014	2910-2913

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		<u>Minoura, M.</u> ; Herber, R. H.; Saito, M.	spectroscopy and theoretical studies of newly synthesized silyl-substituted dilithiostannoles (DOI:10.1021/om5003717)			
85.	※	Daicho, Y.; Watanabe, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Kawashima, T.	<u>Aziridine formation with retention of configuration from a pentacoordinated 1,2-thiazetidine bearing two chiral centers at the 3- and 4-positions(* 論 85)</u> (DOI:10.1246/bcsj.20140132)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (87)	2014	1005-1012
86.		Daicho, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Kawashima, T.	<u>Synthesis, Structure, and Thermolysis of Tetracoordinated 1λ4,2-Selenazetidines Bearing Two Chiral Centers at the 3- and 4-Positions(* 論 86)</u> (DOI:10.1002/hc.21177)	Heteroat. Chem. (25)	2014	492-499
87.	※	Saito, M.; Matsumoto, K.; Fujita, M.; <u>Minoura, M.</u>	Unexpected Dehalogenation Reactions of Dichloroborane Bearing a NCN-Pincer Ligand: Formation of a Borenium Salt (DOI:10.1002/hc.21211)	Heteroat. Chem (25)	2014	354-360
88.	※	Pop, L.-C.; Kurokawa, N.; Ebata, H.; Tomizawa, K.; Tajima, T.; Ikeda, M.; Yoshioka, M.; Biesemans, M.; Willem, R.; <u>Minoura, M.</u> ; Saito, M.	Synthesis and Structures of Monomeric Group 14 Triols and Their Reactivity (DOI: 10.1139/cjc-2013-0496)	Can. J. Chem. (92)	2014	542-548
89.	※	<u>Edamoto, K.</u> ; Imanishi, S.; Masuda, S.; Kakefuda, Y.; Ozawa, K.	Angle-resolved photoemission study of Ni ₂ P(10 $\bar{1}$ 0): Change in the surface electronic structure induced by P segregation	e-J. Surf. Sci. Nanotech. (12)	2014	175-178
90.	※	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u> ; Matsunami, M.;	Soft X-ray photoelectron spectroscopy study of Fe ₂ P(0001) (DOI: 10.1016/susc.2014.01.012)	Surf. Sci. (624)	2014	21-24

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Hajiri, T.; Kimura, S.				
91.	※	Ozawa, K.; Mimori, Y.; Kato, H.; Emori, M.; Sakama, H.; Imanishi, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Mase, K.	Shockley surface state on α -brass (111) and its response to oxygen adsorption (DOI: 10.1016/j.susc.2013.12.012)	Surf. Sci. (623)	2014	6-12
92.	※	Ozawa, K.; Mimori, Y.; Kato, H.; Imanishi, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Mase, K.	Photoelectron spectroscopy study of interaction of oxygen with the (111) surface of a Cu-Zn alloy (DOI: 10.1016/j.susc.2013.12.011)	Surf. Sci. (623)	2014	1-5
93.	※	Kakefuda, Y.; Munakata, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Igari, Y.; Komeda, T.	The interaction of gold nanoparticles with a TiO ₂ film formed on Si(100) (DOI: 10.7567/JJAP.53.075002)	Jpn. J. Appl. Phys. (53)	2014	075002 1-4
94.	※	Sumi, T.; Takagi, Y.; Yagi, A.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Photoirradiation wavelength dependence of cycloreversion quantum yields of diarylethenes</u> (* 論 94) (DOI: 10.1039/c4cc00396a)	Chem. Commun. (50)	2014	3928- 3930
95.	※	Ichikawa, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	Asymmetric photoreaction of a diarylethene in hydrogen-bonded cocrystals with chiral molecules (DOI: 10.1039/c3pp50239b)	Photochem. Photobiol. Sci. (13)	2014	199-204
96.	※	Pinkowicz, D.; Ren, M.; Zheng, L.-M.; Sato, S.; Hasegawa, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; Breedlove, B. K.; Cosquer, G.; Katoh, K.; Yamashita, M.	<u>Control of the single-molecule magnet behavior of lanthanide-diarylethene photochromic assemblies by irradiation with light</u> (* 論 96) (DOI: 10.1002/chem.201402647)	Chem. Eur. J. (20)	2014	12502- 12513
97.	※	Fukaminato, T.;	<u>Molecular design strategy toward</u>	J. Am.	2014	17145-

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Hirose, T.; Doi, T.; Hazama, M.; Matsuda, K.; <u>Irie, M.</u>	<u>diarylethenes that photoswitch with visible light</u> (* 論 97) (DOI: 10.1021/ja5090749)	Chem. Soc. (136)		17154
98.	※	Wakabayashi, M.; Yokojima, S.; Fukaminato, T.; Shiino, K.-I.; <u>Irie, M.</u> ; Nakamura, S.	Anisotropic dissymmetry factor, g: Theoretical investigation on single molecule chiroptical spectroscopy (DOI: 10.1021/jp409559t)	J. Phys. Chem. A (118)	2014	5046- 5057
99.	※	<u>Irie, M.</u> ; Fukaminato, T.; Matsuda, K.; Kobatake, S.	Photochromism of diarylethene molecules and crystals: Memories, switches, and actuators (DOI: 10.1021/cr500249p)	Chem. Rev. (114)	2014	12174- 12277
100.	※	Sugahara, A.; Tanaka, N.; Okazawa, A.; <u>Matsushita, N.</u> ; Kojima, N.	Photochromic Property of Anionic Spiropyran Having Sulfonate-Substituted Indoline Moiety (DOI: 10.1246/cl.130904)	Chem. Lett. (43)	2014	281-283
101.	※	Yagai, S.; Iwai, K.; Yamauchi, M.; Karatsu, T.; Kitamura, A.; Uemura, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; Wang, H.; Würthner, F.	Photocontrol over self-assembled nanostructures of π - π stacked dyes supported by the parallel conformer of diarylethene (DOI: 10.1002/anie.201310773)	Angew. Chem. Int. Ed. (53)	2014	2602- 2606
102.	※	Yamaguchi, T.; Kamihashi, Y.; Ozeki, T.; Uyama, A.; Kitai, J.; Kasuno, M.; Sumaru, K.; Kimura, Y.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; Uchida, K.	Photochromic reaction of diarylethenes having phenol moiety as an aryl ring (DOI: 10.1246/bcsj.20130252)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (87)	2014	528-538

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

103.	※	Yamaguchi, T.; Hosaka, M.; Shinohara, K.; Ozeki, T.; Fukuda, M.; Takami, S.; Ishibashi, Y.; Asahi, T.; <u>Morimoto, M.</u>	Photochromism and fluorescence properties of 1,2-bis(2-alkyl-1-benzothiophene-3-yl)perhydrocyclopentenes (DOI: 10.1016/j.jphotochem.2014.04.007)	J. Photochem. Photobiol. A (285)	2014	44-51
104.	※	Tatsumi, Y.; Fujinaga, N.; Kasuno, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	A photo- and halochromic multicolor switching system consisting of diarylethene and malachite green moieties (DOI: 10.1039/C4NJ00434E)	New J. Chem. (38)	2014	5706-5714
105.	※	Shimizu, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Synthesis of silica xerogels using silane monomer and poly(dimethylsiloxane) as precursors	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	2743-2744
106.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Usugi, S.	Effects of molecular weight and catalyst on stereoblock formation <i>via</i> solid state polycondensation of poly(lactic acid) (DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2014.02.006)	Eur Polym. J. (54)	2014	62-70
107.	※	Nara, S.; <u>Oyama, H. T.</u>	Effects of partial miscibility on the structure and properties of novel high performance blends composed of poly(<i>p</i> -phenylene sulfide) / poly(phenylsulfone) (DOI:10.1038/pj.2014.21)	Polymer J. (46)	2014	568-575
108.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Monolithic porous poly(lactic acid) (PLA) with stereocomplex crystals	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	3753-3754
109.	※	Tanishima, D.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Maekawa, S.; Usugi, S.	Water-disintegrative and biodegradable blends containing poly(L-lactic acid)	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	3739-3740
110.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Usugi, S.	Effects of molecular weight and catalyst on stereoblock formation <i>via</i> solid state poly-	Eur. Polym. J. (54)	2014	62-70

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			condensation of poly(lactic acid) (DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2014.02.006)			
111.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Higashi, K.; Takahashi, R.; Hirumi, Y.; Kobayashi, K.	<u>Enhanced Photostability of an Anthracene-based Dye due to Supramolecular Encapsulation: A New Type of Photostable Fluorophore for Single-molecule Study</u> (* 論 111) (DOI: 10.1039/C4PP00065J)	Photochem. & Photobiol. Sci., (13)	2014	1130-1136
112.	※	Hosoya, N.; Takegami, R.; Suzumura, J.; Yada, Y.; Miyajima, K.; <u>Mitsui, M.</u> ; Knickelbein, M. B.; Yabushita, S.; Nakajima, A.	“Formation and Electronic Structures of Organoeuropium Sandwich Nanowires (DOI: 10.1021/jp5011007)	J. Phys. Chem. A (118)	2014	8298-8308
113.	※	Hirumi, Y.; Tamaki, K.; Namikawa, T.; Kamada, K.; <u>Mitsui, M.</u> ; Suzuki, K.; Kobayashi, K.	Encapsulation with Protrusion of Cruciform 9,10-Bis(arylethynyl)anthracene Derivatives in a Self-assembled Boronic Ester Cavitand Capsule: Photochemical and Photophysical Properties (DOI: 10.1002/asia.201400042)	Chem. Asian J. (9)	2014	1282-1290
114.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Ata, S.; Tomonoh, S.; Yamada, T.; Yumura, M.; Hata, K.	Elastomeric Thermal Interface Materials with High Through-Plane Thermal Conductivity from Carbon Fiber Fillers Vertically Aligned by Electrostatic Floccing (DOI: 10.1002/adma.201401736)	Adv. Mater. (26)	2014	5857-5862
115.	※	Kawai, T.; Watanabe, M.; <u>Uetani, K.</u> ; Fukushima, Y.; Sueyoshi, K.; Kubo, T.; Kitagawa, F.; Yaho, H.;	Hydrophilic Interaction Electrokinetic Chromatography Using Bio-based Nanofillers (DOI: 10.1002/elps.201300558)	Electrophoresis (35)	2014	1517-1528

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Otsuka, K.				
116.	※	Chen, W.; Abe, K.; <u>Uetani, K.</u> ; Yu, H.; Liu, Y.; Yano, H.	Individual Cotton Cellulose Nanofibers: Pretreatment and Fibrillation Technique (DOI: 10.1007/s10570-014-0172-z)	Cellulose (21)	2014	1517-1528
117.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Watanabe, Y.; Abe, K.; Yano, H.	Influence of Drying Method and Precipitated Salts on Pyrolysis for Nanocelluloses (DOI: 10.1007/s10570-014-0242-2)	Cellulose (21)	2014	1631-1639
118.	※	Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Tsukamoto, T.; Kato, A.; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Nakano, T.	<u>Three- and four-body corrected fragment molecular orbital calculations with a novel subdividing fragmentation method applicable to structure-based drug design</u> (* 論 118) (DOI: 10.1016/j.jmgm.2013.01.006)	J. Mol. Gr. Mod. (41)	2013	31-42
119.	※	<u>Komeij, Y.</u> ; Fujiwara, T.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Dynamic fragmentation with static fragments (DF/SF) algorithm designed for ab initio fragment molecular orbital based-molecular dynamics (FMO-MD) simulations for polypeptides (DOI: 10.1273/cbij.13.45)	CBI-J. (13)	2013	45-57
120.		<u>望月祐志</u>	<u>FMO 法における電子相関計算</u> (* 論 120) (DOI: 10.11546/cicsj.31.62)	日本化学会 情報化学部 会誌 (31)	2013	64-72
121.	※	Sawada, H.; Onoda, K.; Morita, D.; Ishitsubo, E.; Matsuno, K.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kuroda, T.; Miyachi, H.	Structure-anti-MRSA activity relationship of macrocyclic bis(bibenzyl) derivatives (DOI:10.1016/j.bmcl.2013.10.069)	Bioorg. Med. Chem. Lett. 23(24),	2013	6563-6568

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

122.	※	Nakabayashi, M.; Tsukahara, Y.; Iwasaki- Miyamoto, Y.; Mihori- Shimazaki, M.; Yamada, S.; Inaba, S.; Oda, M.; Shimizu, M.; Makishima, M.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Ikura, T.; Ito, N.	Vitamin D Receptor Mutants R270L and W282R Bound to 1,25-Dihydroxyvitamin D3 and Synthetic Ligands (DOI:10.1021/jm400537h)	J. Med. Chem. 56(17)	2013	6745- 6760
123.	※	Minami, A.; Ishibashi, S.; <u>Ikeda, K.</u> ; Ishitsubo, E.; Hori, T.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Taguchi, R.; Ieno, D.; <u>Otsubo, T.</u> ; Matsuda, Y.; Sai, S.; Inada, M.; Suzuki, T.	Catalytic preference of Salmonella typhimurium LT2 sialidase for N-acetylneuraminic acid residue over N-glycolylneuraminic acid residue (DOI:10.1016/j.fob.2013.05.002)	FEBS Open Bio. (3)	2013	231- 236
124.	※	Akai, S.; Takagi, A.; Ikawa, T.; Kurita, Y.; Saito, K.; Azechi, K.; Egi, M.; Itoh, Y.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kita, Y.	Generation of 3-Borylbenzynes, Their Regioselective Diels-Alder Reactions, and Theoretical Analysis (DOI:10.1016/j.tet.2013.03.016)	Tetrahedron 69(21)	2013	4338- 4352
125.	※	Katsuyama, I.; Chouthaiwale, P.V.; Cui, H.-L.; Ito, Y.;	Substituent-dependent reactivity in aldehyde transformations: 4-(phenylethynyl)benzaldehydes versus simple benzaldehydes (DOI:10.1016/j.tet.2013.03.056)	Tetrahedron 69(20)	2013	4098- 4104

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Sando, A.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Tanaka, F.			
126.	※	Ikawa, T.; Takagi, A.; Goto, M.; Aoyama, Y.; Ishikawa, Y.; Itoh, Y.; Fujii, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Akai, S.	Regiocomplementary Cycloaddition Reactions of Boryl- and Silylbenzynes with 1,3-Dipoles: Selective Synthesis of Benzo-Fused Azole Derivatives (DOI:10.1021/jo302802b)	J. Org. Chem. 78(7)	2013 2965-2983
127.	※	Yoshida, M.; Nagasawa, Y.; Kubara, A.; Hara, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Mechanistic study of asymmetric Michael addition of malonates to enones catalyzed by a primary amino acid lithium salt(* 論 127)</u> (DOI:10.1016/j.tet.2013.09.066)	Tetrahedron (69)	2013 10003-10008
128.	※	Mori, K.; Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Prediction of suitable catalyst by ¹H NMR: asymmetric synthesis of multisubstituted biaryls by chiral phosphoric acid catalyzed asymmetric bromination(* 論 128)</u> (DOI:10.1039/c3sc52142g)	Chem. Sci. (4)	2013 4235-4239
129.	※	Saito, K.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Oxidative Kinetic Resolution of Indolines Based on Transfer Hydrogenation to Imines(* 論 129)</u> (DOI:10.1021/ja406004q)	J. Am. Chem. Soc. (135)	2013 11740-11743
130.	※	Nishino, R.; Furuta, T.; Kan K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sasamori, T.; Tokitoh, N.; Kawabata, T.	<u>Investigation of the Carboxylate Position during the Acylation Reaction Catalyzed by Biaryl DMAP Derivatives with an Internal Carboxylate(* 論 130)</u> (DOI: 10.1002/anie.201300665)	Angew. Chem. Int. Ed. (52)	2013 6445-6449
131.	※	Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>DFT Study of Mechanism and Origin of Enantioselectivity in Chiral BINOL-Phosphoric Acid Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ketimine and α-Imino Ester Using Benzothiazoline(* 論 131)</u>	J. Org. Chem. (78)	2013 3731-3736

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			(DOI: 10.1021/jo4002195)			
132.	※	Mori, K.; Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Enantioselective Synthesis of Multisubstituted Biaryl Skeleton by Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Desymmetrization/Kinetic Resolution Sequence</u> (* 論 132) (DOI: 10.1016/j.tet.2013.09.066)	J. Am. Chem. Soc. (135)	2013	3964-3970
133.	※	Itoh, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Mikami, K.	Theoretical Study on the Regioselectivity of Baeyer-Villiger Reaction of α -Me-, -F-, -CF ₃ -Cyclohexanones (DOI: 10.1039/c3sc52142g)	J. Org. Chem.	2013	146-153
134.	※	Ishikawa, Y.; Miyamoto, K.; <u>Horn, E.</u>	Crystal structure of <i>trans</i> -diacetonitrile diaqua(<i>N,N,N',N'</i> -tetramethylethylenediamine) nickel(II) diiodide, [Ni(<i>tmen</i>)(CH ₃ CN) ₂ (H ₂ O) ₂] ²⁺ ·2I ⁻ , C ₁₀ H ₂₆ I ₂ N ₄ NiO ₂ (DOI: 10.1524/ncrs.2013.0049)	Z. Kristallogr. NCS. (228)	2013	167-168
135.	※	Ishikawa, Y.; Miyamoto, K.; <u>Horn, E.</u>	Crystal structure of μ_3 -fluoro-tri- μ_2 -fluoro- <i>tris</i> (tetramethylethylenediamine nickel(II)) fluoride trihydrate, [Ni ₃ (<i>tmen</i>) ₃ F ₅] ⁺ ·F ⁻ ·3H ₂ O, C ₁₈ H ₅₄ F ₆ N ₆ Ni ₃ O ₃ (DOI: 10.1524/ncrs.2013.0019)	Z. Kristallogr. NCS (228)	2013	126-128
136.	※	Wang, J.-F.; Gong, X.; Chiang, Y.-C.; <u>Kuroda, C.</u>	Phylogenetic patterns and disjunct distribution in <i>Ligularia hodgsonii</i> Hook. (Asteraceae) (DOI: 10.1111/jbi.12114)	J. Biogeography (40)	2013	1741-1754
137.	※	Saito, Y.; Ichihara, M.; Takiguchi, K.; Tanio, Y.; Okamoto, Y.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C.</u> ; Kawahara, T.; Gong, X.; Tori, M.	Chemical and Genetic Diversity of <i>Cremanthodium lineare</i> (DOI: 10.1016/j.phytochem.2013.08.009)	Phytochemistry (96)	2013	184-190
138.	※	Saito, Y.;	Four new compounds from <i>Ligularia</i>	Tetrahedron	2013	8505-

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Taniguchi, M.; Komiya, T.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	<i>virgaurea</i> : isolation of eremophilane and noreremophilane sesquiterpenoids and the absolute configuration of 2 α -hydroxyeremophil-11-en-9-one by CD spectrum and DFT calculation (DOI: 10.1016/j.tet.2013.06.104)	(69)		8510
139.	※	Saito, Y.; Iwamoto, Y.; Okamoto, Y.; Kawahara, T.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Eight New Alkyne and Alkene Derivatives from Four <i>Saussurea</i> Species Collected in China	Nat. Prod. Commun. (8)	2013	631-634
140.	※	<u>Wada, T.</u> ; Maki, H.; Imamoto, T.; Yuki, H.; Miyazato, Y.	<u>Four-electron reduction of dioxygen catalyzed by dinuclear cobalt complexes bridged by bis(terpyridyl)anthracene</u> (* 論 140) (DOI: 10.1039/c2cc36528f)	Chem. Commun. 49 (39)	2013	4394-4396
141.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Isogai, R.	<u>Estimation of Molecular Diffusivity in Liquid Phase Systems on the Basis of the Absolute Rate Theory</u> (* 論 141) (DOI: 10.2116/analsci.29.467)	Anal. Sci. (29)	2013	467-472
142.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Matsumoto, Y.; Ando, N.; Teratani Y.	<u>Measurement of Pore Diffusivity in Separation Media for High Performance Liquid Chromatography</u> (* 論 142) (DOI: 10.2116/analsci.29.315)	Anal. Sci. (29)	2013	315-323
143.	※	Fuku-en, S.-i.; Yamamoto, J.; <u>Minoura, M.</u> ; Kojima, S.; Yamamoto, Y.	Synthesis of New Dipyrido-Annulated <i>N</i> -Heterocyclic Carbenes with Ortho Substituents (DOI: 10.1021/ic402301u)	Inorg. Chem. (52)	2013	11700-11702
144.	※	Saito, M.; Akiba, T.; Kaneko, M.; Kawamura, T.; Abe, M.; Hada, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis, Structure, and Reactivity of Lewis Base Stabilized Plumbacyclopentadienylidenes (DOI: 10.1002/chem.201303672)	Chem., Eur. J. (19)	2013	16946-16953
145.	※	Sashida, H.;	Studies on Chalcogen-containing	Tetrahedron	2013	6478-

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Kaname, M.; <u>Minoura, M.</u>	Heterocycles. Part 38: Regio- and Stereoselective Tandem Addition-iodocyclization of 2-Ethynylphenyl Isothiocyanates with <i>N</i> - and <i>O</i> -Nucleophiles Affording 4-(Iodoalkylidene)benzo[d][1,3]thiazines (DOI: 10.1016/j.tet.2013.05.069)	(69)		6487
146.	※	<u>Edamoto, K.</u>	The electronic properties of nickel phosphide surfaces: Angle-resolved and resonant photoemission studies (DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.09.055)	Appl. Surf. Sci. (269)	2013	7-11
147.	※	Shoji, Y.; Yagi, A.; Horiuchi, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Photochromic diarylethene derivatives bearing hydrophilic substituents</u> (* 論 147) (DOI: 10.1002/ijch.201300018)	Isr. J. Chem. (53)	2013	303-311
148.	※	Takami, S.; Shimizu, A.; Shimizu, K.; Miyoshi, R.; Yamaguchi, T.; <u>Irie, M.</u>	Photochromic performance of 1-thiazolyl-2-vinylcyclopentene derivatives having a phenyl- or 4-methoxyphenyl-substituted olefin (DOI: 10.1246/bcsj.20130091)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (86)	2013	1059-1064
149.	※	Mori, H.; Kojima, R.; Mochizuki, Y.; Uenohara, W.; Umezawa, I.; <u>Matsushita, N.</u>	Importance of spin-orbit coupling effect and solvent effect in electronic transition assignments of Pt ^{II} complexes: in the case of <i>cis/trans</i> -[Pt ^{II} Cl ₂ (NH ₃) ₂] (DOI: 10.1016/j.molstruc.2012.11.027)	J. Mol. Struct. (1035)	2013	218-223
150.	※	Yoda, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Generation of polylactic acid-based urethanes containing stereocomplex crystals	Polym. Prep. Jpn (62)	2013	2064-2065

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

<図書>

No	著者名	書名	出版社	発行年	総頁数
1.	ナノセルロースフォーラム (<u>上谷幸治郎</u> ・執筆分担)	図解よくわかるナノセルロース	日刊工業新聞社	2015	208
2.	<u>望月祐志</u> , 高田彰二, 林重彦, 等	計算科学ロードマップ白書	理化学研究所 計算科学研究機構	2014	339
3.	<u>Wada, T.</u> ; Tanaka, K.; Muckerman, J. T.; Fujita, E.; et al.	<u>Water Oxidation by Ruthenium Complexes with Non-Innocent Ligands</u> (* 図書 3) (Molecular Water Oxidation Catalysis)	Wiley & Sons, Ltd.	2014	282
4.	<u>宮部寛志</u> , 橋本剛, 早下隆士, 等	クロマトグラフィー分離機構のモ-メント解析理論(ぶんせき No. 11)	日本分析化学会	2014	51
5.	<u>Irie, M.</u> ; Kobayashi, S.; Müllen, K.; et al.	Photochromic Polymers (Encyclopedia of Polymeric Nanomaterials)	Springer	2014	2672
6.	<u>三井正明</u> , 中林孝和, 等	光化学の事典-だれでもわかる 光化学の初歩-	朝倉書店	2014	418
7.	<u>Irie, M.</u> ; Yokoyama, Y.; Seki, T.; et al.	Photomechanical Response of Diarylethene Single Crystals (New Frontiers in Photochromism)	Springer	2013	293

<学会発表>

No.	発表者名	発表表題	学会名	開催地	発表年月
1.	野田洋史・寺田眞浩・榎山儀恵・ <u>山中正造</u>	カルボン酸-リン酸触媒を用いた不斉ヘテロ Diels-Alder 反応の理論的研究	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
2.	亀井優斗・渡辺旺嗣・杉山典幸・井孝義・矢部真之介・ <u>山中正造</u>	ビスアミノイミノピナフトール 亜鉛三核錯体を用いた不斉 ヨードラクトン化反応の理論的研究”	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

3.	中野克洋・小田木陽・長澤和夫・ <u>山中正造</u>	グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応に関する理論的研究	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
4.	宍戸健人・ <u>山中正造</u>	二点水素結合を介した立体・会合制御を基盤とする超分子型不斉触媒の開発	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
5.	岡直輝・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による α -ケトエステルの不斉アルキル化反応における基質一般性の拡張	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
6.	倉澤香澄、 <u>山中正造</u>	金属ビスアミジン触媒を用いた α -ケトエステルの不斉ビニロガス向山アルドール反応の開発	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
7.	野本拓実、 <u>山中正造</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いたインドールと α 置換- β -ニトロアクリレートの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
8.	市之瀬篤・ <u>山中正造</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を用いた α -ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応におけるエナンチオ選択性の逆転現象	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
9.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	単核ルテニウム-ビス(ターピリジル)アントラセン錯体とルイス酸性金属イオンとの相互作用	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
10.	安藤友宏・ <u>和田亨</u>	複数の窒素原子を含む複素環配位子を有するルテニウム錯体の酸塩基平衡と酸化還元挙動	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	
11.	原 奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両オルト位に有する <i>N</i> -チオスルフィニルアニリンの合成と反応	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
12.	石原充裕・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシル基を基盤とする新規脂肪族立体保護基の合成と 16 族元素高反応性化学種安定化への応用	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
13.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	かさ高い置換基を導入したシ	日本化学会	同志社大学	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>浦真生</u>	ラン類の合成と反応	第 96 春季年会	(京田辺市)	
14.	<u>小林 翔</u> ・ <u>箕浦真生</u>	炭素置換基のみを有する 6 価テルルモノ及びジカチオン種の合成と官能基化	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
15.	<u>鈴木文陽</u> ・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両メタ位に有するかさ高い芳香族置換基の合成	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
16.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Tautomerization and Reaction of a kinetic Stabilized Enesulfenic Acid	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
17.	<u>入江達也</u> ・ <u>行本万里子</u> ・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両オルト位に導入したベンゼンチオール誘導体とスルフェン酸の合成	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
18.	<u>速川琴菜</u> ・ <u>箕浦真生</u>	テトラアリアルテルル(IV)の熱安定性	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
19.	<u>枝元一之</u> ・ <u>中村卓哉</u> ・ <u>杉崎裕一</u> ・ <u>小澤健一</u>	Ag(100)表面におけるバナジウム酸化物薄膜の合成	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
20.	<u>本山寛大</u> ・ <u>枝元一之</u> ・ <u>杉崎裕一</u> ・ <u>小澤健一</u>	Fe ₂ P(10-10)表面における共鳴光電子分光	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
21.	<u>杉崎裕一</u> ・ <u>本山寛大</u> ・ <u>大和千春</u> ・ <u>枝元一之</u> ・ <u>小澤健一</u>	リン偏析に伴う Fe ₂ P(10-10)の電子状態の変化	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
22.	<u>市川智浩</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリアルエテンのフォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
23.	<u>稲葉航平</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジピロリルエテン誘導体の熱退色型フォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
24.	<u>千葉宏香</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	交互積層法によるフォトメカニカル分子結晶表面の高分子修飾 (口頭発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
25.	<u>檜原遼太</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリアルエテンの単結晶フォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
26.	<u>稲留徹</u> ・ <u>八木</u>	蛍光性ジアリアルエテンの水	日本化学会	同志社大学	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>亮・森本正和・入江正造</u>	中におけるフォトクロミズムと蛍光特性 (ポスター発表)	第 96 春季年会	(京田辺市)	
27.	村松正康・安田直晃・池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和・入江正造</u>	Ti:Sapphire レーザー照射による高次多光子吸収を用いたジアリールエテンの一波長開環-閉環反応制御 (ポスター発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
28.	田中李叶子, <u>松下信之</u>	鉄錯体電子ドナーとジヒドロピピリジニウムからなる電荷移動塩の相変化	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
29.	加藤 茜, <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金錯体とプロピルビオロゲンからなる電荷移動塩の発光の湿度依存性	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
30.	波多野絵理・ <u>森本正和</u> ・横島智・中村振一郎・安田伸広・内田欣吾	ペルフルオロシクロヘキセン環を有するジアリールエテンのフォトクロミズム (ポスター発表)	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
31.	奥脇弘次・ <u>望月祐志</u> ・川田修太郎・小沢拓・大畠広介	フラグメント分子軌道計算と粗視化シミュレーションの連携の試み	2015 年度 高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会合同討論会	大阪大学 (北区)	2016/3
32.	<u>望月祐志</u> ・奥脇弘次・川田修太郎・石川雄太郎・加藤幸一郎・大畠広介・小沢拓	フラグメント分子軌道法の高分子関連分野への応用	2015 年度 高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会合同討論会	大阪大学 (北区)	2016/3
33.	加藤幸一郎・石川雄太郎・奥脇弘次・川田修太郎・ <u>望月祐志</u> ・小沢拓	FMO 法に基づく高分子材料とシリカナノ粒子の相互作用モデリング	2016 年応用物理学会春季学術講演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
34.	奥脇弘次・川田修太郎・ <u>望月祐志</u> ・大畠広介・小沢拓	FMO 計算を援用する高分子マルチスケールシミュレーション	2016 年応用物理学会春季学術講演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

35.	<u>望月祐志</u> ・ <u>古明地勇人</u> ・井山剛志・奥沢明・牧村健・中西貴哉・田中成典	機械学習を援用した Chignolin のアミノ酸残基間の相互作用解析	2016 年応用物理学会春季学術講演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
36.	川田修太郎・坂口正貴・米倉伊吹・奥脇弘次・ <u>望月祐志</u> ・ <u>福澤薫</u>	ペプチド類のフラグメント分子軌道計算	2016 年応用物理学会春季学術講演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
37.	<u>常盤広明</u> ・中村昇太・松尾直也・山本雄大・岡崎誠司・ <u>望月祐志</u> ・川上勝	3D プリンタが切り開く新規創薬カテゴリ (見て、触って、閃いて! 今開かれる新たな創薬の世界) (報道向けハイライト講演、口頭発表)	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
38.	井川貴詞・福元豊・村上智成・高木晃・青山浩・山本雄大・ <u>常盤広明</u> ・赤井周司	多環式ベンザインの環化付加反応による新規ヘリセン様分子の合成	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
39.	加藤裕也・横田智・Nongluk SRIWILAIJAR OEN・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	梅エキス抽出物を先導化合物とした新規作用機序を示す抗インフルエンザ薬の開発	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
40.	岡崎誠司・松尾直也・石坪江梨花・島野仁・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
41.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・von Itzstein MARK・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算および分子動力学シミュレーションを用いた抗ヒトパラインフルエンザ薬に関する理論的研究	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
42.	山本雄大・松尾直也・高木晃・井川貴詞・赤井	顕わに溶媒分子を考慮した溶媒効果に基づく環状付加反応の理論的研究	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>周司・常盤広明</u>				
43.	熊谷茜・Rocio Garcia OTERO・松尾直也・岡崎誠司・渡會友祐・榎島誠・山田幸子・Antonio MOURINO・ <u>常盤広明</u>	ビタミンD受容体とリガンド複合体の水素結合ネットワークに関する理論的解析	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
44.	夏目継介・松尾直也・岡崎誠司・中野祥吾・伊藤創平・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	RXR パーシャルアゴニストに関する理論的研究	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
45.	丸藤友彦・岡崎誠司・武井健太・中川嘉・島野仁・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算および MD シミュレーションによる核内受容体 PPARs と遊離脂肪酸との理論的結合解析	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
46.	井川貴詞・福元豊・村上智成・高木晃・青山浩・山本雄大・ <u>常盤広明</u> ・赤井周司	多環式ベンザインの環化付加反応による新規ヘリセン様分子の合成	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
47.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザ A 型ウイルスのヘマグルチニンと硫酸化糖脂質スルファチドの理論的結合解析	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
48.	石川雄規・松尾直也・津吹政可・加藤大志・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	ムンプスウイルス表面タンパク質 HN に関する理論的研究	日本薬学会第136年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
49.	<u>常盤広明</u>	先行事例発表 第一原理計算を用いた合理的創薬(依頼講演)	第 28 回 CMD ワークショップ	大阪大学(茨木市)	2016/3
50.	Ishihara, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis, Structure and Reactivity of Thermally Stable Sulfenic Acid a Novel Aliphatic Steric Protection Group	The 3 rd International Symposium for Young Chemists on Stimuli-	名古屋大学(名古屋市)	2016/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules		
51.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reactivity of Tetraphenyltellurium(VI) Dications	The 3 rd International Symposium for Young Chemists on Stimuli- responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	名古屋大学 (名古屋市)	2016/3
52.	Hara, N.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reaction of <i>N</i> -Thiosulfinylaniline Derivative Bearing 9-Triptycyl Groups	The 3 rd International Symposium for Young Chemists on Stimuli- responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	名古屋大学 (名古屋市)	2016/3
53.	吉信淳・近藤 寛・坂本一之・ 小澤健一・櫻井 岳暁・ <u>枝元一</u> 之・中辻寛・間 瀬一彦・中村潤 児	エネルギー変換材料の表面 界面物性:VUV/SX 放射光 分光による研究	2015 年度量子ビ ームサイエンスフ ェスタ	つくば国際会議 場 (つくば市)	2016/3
54.	<u>枝元一之</u> ・石田 周平・杉崎裕 一・中村卓哉	Ag(100)上に作成したバナジ ウム酸化物結晶性薄膜の NEXAFS と軟 X 線 PES によ る研究	2015 年度量子ビ ームサイエンスフ ェスタ	つくば国際会議 場 (つくば市)	2016/3
55.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道法プロ グラム ABINIT-MP のものづ くり分野への展開 (依頼講演)	産応協、CMSI、 ポスト京重点課 題 5・6・7 合同産 学官連携シンポ ジウム 2016	ステーションコ ンファレンス東 京 (千代田区)	2016/2
56.	中野祥吾・伊藤	量子化学およびバイオインフ	5th Negative	ホテルモントレ	2016/1

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	創平・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	オマテックス手法を用いたパラミクソウイルスの創薬標的タンパク質に関する理論的研究	Strand Virus-Japan Symposium	沖縄 (国頭郡)	
57.	<u>宮部寛志</u>	非固定化かつ非化学修飾状態における分子間相互作用の速度解析法	第6回化粧品開発展	東京ビッグサイト (江東区)	2016/1
58.	<u>Mitsui, M.</u> ; Mori, K.; Wakabayashi, N.; Kawano, Y.	Laser Microscopy Approach to Reveal Heterogeneous Photovoltaic Characteristics and Photoconversion Kinetics in Dye-sensitized Solar Cells (招待講演)	EMN Meeting on Photovoltaics 2016	Hong Kong, (China)	2016/1
59.	<u>Fukuzawa, K.</u> ; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; Watanabe, H.; Honma, T.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Anzaki, S.; Tanaka, S.	Application of fragment molecular orbital method for structure-based drug design	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
60.	Sakaguchi, M.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Benchmark for new fragmentation breaking peptide bonds	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
61.	Fujita, Y.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.; <u>Ikeda, K.</u> ; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical interaction analysis between hemagglutinin of influenza A virus and sulfatide	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
62.	Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Nakano, Y.; Shimano, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study on potency and selectivity of dipeptidyl peptidase IV inhibitors using the first-principles calculation	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
63.	<u>Yamanaka, M.</u>	Transition-state stabilization through multiple attractive non-covalent interactions in organocatalysis: A computational study	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

64.	Nomoto, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Ag(I)-bisamidine catalyzed asymmetric Friedel-Crafts alkylation of indoles with α -substituted- β -nitroacrylates	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
65.	Yamamoto, E.; <u>Yamanaka, M.</u>	DFT study of chiral phosphoric acid catalyzed 1, 4-reduction of α,β -unsaturated ketones	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
66.	Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical study on chiral bis-phosphoric acid catalyzed asymmetric Diels-Alder reaction	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
67.	Shishido, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Development of self-assembled asymmetric catalyst based on two-point hydrogen bonding interaction	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
68.	Nishimura, S.; <u>Wada, T.</u> ; Miyazato, Y..	Water oxidation catalyzed by the dinuclear ruthenium complex bridged by bis(terpyridyl)anthraquinone	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
69.	Tokinobu, H.; Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Synthesis and characterization of a pyrophosphate-bridged dinuclear ruthenium complex with 1,4,7-triethyl-1,4,7-triazacyclononane	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
70.	Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Construction of new water oxidation catalyst with a pyrophosphate-bridged Ru ₂ (III, IV) framework	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
71.	Wada, M.; Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Four-electron reduction of dioxygen catalyzed by dinuclear cobalt complex	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
72.	<u>Miyabe, K.</u> ;	Chromatographic Capillary	The 2015	Hawaii,	2015/12

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Shimazaki, Y.	Electrophoresis (CCE): A Method for Kinetic Study of Intermolecular Interaction	International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	(USA)	
73.	Shimazaki, Y.; <u>Miyabe, K.</u>	Kinetic study of intermolecular interaction by capillary electrophoresis ~Clathration reaction of thymol with sulfated- β -cyclodextrin~	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
74.	<u>Edamoto, K.</u> ; Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.	NEXAFS and soft X-ray photoelectron spectroscopy studies on ordered V oxide films on Ag(100)	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
75.	Tanaka, R.; <u>Matsushita, N.</u>	Acid-induced vapochromism on a charge-transfer salt composed of an organic acceptor and an iron(II)complex	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
76.	Kato, A.; Uenohara, W.; <u>Matsushita, N.</u>	Humidity-dependence of luminescent property on a charge-transfer salt composed of tetracyanidoplatinate(II) and an organic acceptor cation	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
77.	Nakamura, Y.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	In vitro hydrolytic degradation of biodegradable poly (L-lactic acid) blend monoliths	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
78.	Yamada, E.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	Effects of the interfacial reaction on morphology and toughness of polyamide 6 blends with ethylene copolymers carrying different reactive groups	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
79.	Okada, T.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	Thermal conductive properties of nanocellulose materials	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

80.	中野祥吾・安川和志・松尾直也・石坪江梨香・常盤広明・浅野泰久	R 選択的な FAD 依存型アミン酸化酵素の基質認識機構解明	第 38 回日本分子生物学会年会、第 88 回日本生化学会大会合同大会	神戸ポートピアホテル (神戸市)	2015/12
81.	宮部寛志・島崎裕紀	分子の固定化や化学修飾が不要な分子間相互作用の速度解析法の開発	新アミノ酸分析研究会第 5 回学術講演会	東京大学武田先端知ビル (文京区)	2015/12
82.	小林 翔・箕浦真生	6 価テルルモノ及びジカチオン種の合成と官能基化	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
83.	古川俊輔・藤田雅大・金富芳彦・箕浦真生・畑中美穂・諸熊奎治・斎藤雅一	ヘキサキス(フェニルセラニル)ベンゼンジカチオンの σ -芳香族性	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
84.	原 奈摘子・箕浦真生	9-トリプチシルメチル基を有する嵩高いアニリン誘導体の合成と反応	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
85.	行本万里子・箕浦真生	9-トリプチシルメチル基を有するシラン類の合成	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
86.	石原充裕・箕浦真生	トリプチシル基を基盤とした立体保護基の合成と含硫黄高反応性化学種安定化への応用	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
87.	入江達也・行本万里子・箕浦真生	トリプチシルメチル基を有する芳香族スルフェン酸の合成	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
88.	枝元一之・中村卓哉・杉崎裕一・小澤健一	Ag(100)におけるバナジウム酸化物超薄膜の合成	第 35 回表面科学学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/12
89.	杉崎裕一・大和千春・本山寛大・為成一輝・枝元一之・小澤健一	内殻準位光電子分光による Fe ₂ P(10-10)	第 35 回表面科学学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/12
90.	Mochizuki, Y.	ABINIT-MP: a program system for fragment molecular orbital calculations (Invited Talk)	5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and	Tokyo, (Japan)	2015/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			Physics - Toward exascale computing		
91.	<u>望月祐志</u>	FMO 計算プログラム ABINIT-MP のものづくり分野への応用 (依頼講演)	J-OCTA ユーザー会議 2015	東京コンファレンスセンター・品川 (港区)	2015/11
92.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	デュアル効果を有する抗パラインフルエンザウイルス薬に対する理論的研究	第33回メディシナルケミストリーシンポジウム	幕張国際研修センター (千葉市)	2015/11
93.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	ウイルス増殖促進シグナルを担うインフルエンザウイルス結合性糖脂質を標的とした新規抗インフルエンザウイルス薬開発の可能性	第33回メディシナルケミストリーシンポジウム	幕張国際研修センター (千葉市)	2015/11
94.	Suzuki, T.; Fukushima K.; Takahashi, T.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Takimoto, T.	Amino acids contributing to α 2,6-sialyl linkage binding of hPIV3 HN protein	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
95.	Fujita, Y.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.; <u>Ikeda, K.</u> ; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical binding analysis of influenza A virus hemagglutinin with sulfatide	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
96.	Igarashi, M.; Sekijima, M.; Yasuo, N.; Abe T.; Yoshida, R.; Watabe, T.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Hirokawa T.; Takada, A.	Computational analysis of common epitope recognized by a broadly neutralizing monoclonal antibody against influenza A virus hemagglutinin	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
97.	Hidari, K.; Abe, T.;	Mechanisms on anti-dengue virus activity of glucuronide	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場	2015/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Sando, A.; Teraoka, F.; <u>Otsubo, T.</u> ; Morita, K.; Suzuki, T.; <u>Tokiwa, H.</u> ; <u>Ikeda, K.</u>	derivatives		(福岡市)	
98.	<u>山中正浩</u>	分子触媒反応における立体制御機構に関する理論的研究	平成27年度後期(秋季)有機合成化学講習会	日本薬学会長井記念館長井記念ホール(渋谷区)	2015/11
99.	<u>宮部寛志</u> ・島崎裕紀	キャピラリー電気泳動法による分子間相互作用の会合・解離速度定数の測定	第37回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	熊本大学(熊本市)	2015/11
100.	Yukimoto, Y.; <u>Minoura, M.</u>	Isolation and Tautomerization of a Stable Enesulfenic Acid Bearing Bulky Group	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive Chemical Species	京都大学(宇治市)	2015/11
101.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Functionalization of Monofluorotetraaryltellurium (VI)	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive Chemical Species	京都大学(宇治市)	2015/11
102.	Suzuki, F.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis of Bulky Aromatic Compounds Bearing 9-Triptycylmethyl Groups in meta-Positions	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive Chemical Species	京都大学(宇治市)	2015/11
103.	田中李叶子・岡澤厚・小島憲道・ <u>松下信之</u>	ジヒドロピリジニウムと鉄錯体からなる電荷移動塩の酸蒸気によるベイポクロミズム	第24回有機結晶シンポジウム	広島大学(広島市)	2015/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

104.	加藤 茜・ <u>松下信之</u>	エチルビオロゲンとテトラシアニド白金(II)錯体からなる電荷移動塩における水分子の取り込み・放出による結晶相変化	第24回有機結晶シンポジウム	広島大学 (広島市)	2015/11
105.	谷島大介・山下明希子・ <u>大山秀子</u> ・小川亮平	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドの加水分解挙動:ブレンドの高次構造および pH 条件の影響 (優秀ポスター賞受賞)	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
106.	中村裕介・ <u>大山秀子</u>	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの加水分解挙動	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
107.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	高熱伝導性ナノセルロースシート	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
108.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	天然由来の高熱伝導ナノファイバー材料	第24回ポリマー材料フォーラム	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/11
109.	中村裕介・ <u>大山秀子</u>	ポリ乳酸ブレンドモノリスの in vitro での加水分解挙動	第24回ポリマー材料フォーラム	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/11
110.	川田修太郎・藤田貴敏・ <u>望月祐志</u>	FMO 法を用いた分子性結晶の扱い	日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会	函館市地域交流まちづくりセンター(函館市)	2015/10
111.	亀井優斗・ <u>山中正浩</u> ・杉山典幸・牧野宏輝・荒井孝義	ビスアミノイミノピナフトール亜鉛三核錯体を用いた触媒的不斉ヨードラクトン化反応の理論的研究	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
112.	中野克洋・ <u>山中正浩</u> ・加藤賢・長澤和夫	グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉フリーデルクラフツ反応の理論的研究	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
113.	小林 翔・ <u>箕浦真生</u>	モノフルオロテトラフェニルテルロニウム塩の合成と官能基化	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
114.	入江達也・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシルメチル基を導入したベンゼンチオール誘導体の合成と反応	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
115.	原奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	複数のトリプチシル基を有するアニリン誘導体の合成と反応	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
116.	加藤 茜・ <u>松下</u>	テトラシアニド白金(II)錯体と	第5回 CSJ 化学	タワーホール	2015/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>信之</u>	ジエチルビオロゲンからなる発光性電荷移動塩の相変化と湿度依存性	フェスタ	船堀 (江戸川区)	
117.	Nakano, S.; Tokiwa, T.; Tateno, H.; Kishimoto, N.; Ito, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Hirabayashi, J.	Development of PyMOL plug-in, PaicsPy, to evaluate protein-ligand interaction by FMO method	20th Shizuoka Forum on Health and longevity	Shizuoka (Japan)	2015/10
118.	中野祥吾・常盤 恭樹・館野浩 章・岸本直樹・ 伊藤創平・ <u>常盤 広明</u> ・平林 淳	タンパク質-リガンド間の高精度全電子計算の実行を支援する PyMOL プラグイン, PaicsPy の開発	TOGO の日シン ポジウム 2015	東京大学 (文京区)	2015/10
119.	井川貴詞・清水 和則・高木晃・ 後藤雅彦・ <u>常盤 広明</u> ・赤井周司	ポリル基を用いるベンザインの多成分位置制御連結反応及びその計算化学的解析	第 41 回反応と合成の進歩シンポジウム	近畿大学 (東大阪市)	2015/10
120.	井川貴詞・福元 豊・村上智成・ 高木晃・青山 浩・ <u>常盤広明</u> ・ 赤井周司	ベンザインの連続環化付加反応による新規らせん状分子の合成	第 65 回日本薬学会近畿支部総会・大会	大阪大谷大学 (富田林市)	2015/10
121.	高木晃・井川貴 詞・清水和則・ <u>常盤広明</u> ・赤井 周司	計算化学を用いるベンザイン多成分連結反応の位置選択性発現機構解析	第 65 回日本薬学会近畿支部総会・大会	大阪大谷大学 (富田林市)	2015/10
122.	西村俊祐・安藤 友宏・宮里裕 二・ <u>和田 亨</u>	ビス(ターピリジル)アントラキノンで架橋された二核ルテニウム錯体による水の酸化の反応機構解明	第 48 回酸化反応 討論会	同志社大学 (京都市)	2015/10
123.	<u>Irie, M.</u>	Diarylethene crystals that convert light into mechanical work: An approach to molecular machinery (招待講演)	International Workshop for Photo- and Electro-Molecular Machines	Toulouse, (France)	2015/10
124.	田中李叶子・ <u>松 下信之</u>	ビピリジン骨格を有する有機アクセプター分子と鉄錯体電子ドナーからなる新規電荷移動塩の構築と結晶構造	日本結晶学会平成 27 年度年会	大阪府立大学 (堺市)	2015/10
125.	岡田拓巳・ <u>上谷</u>	ナノセルロース不織シートの	第 36 回日本熱物	東北大学	2015/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>幸治郎・大山秀子</u>	熱拡散率における結晶子サイズ効果	性シンポジウム	(仙台市)	
126.	<u>加藤幸一郎・福澤薫・望月祐志</u>	FMO法を用いたアパタイト結晶表面とペプチドの相互作用解析(招待発表)	2015年応用物理学会秋季学術講演会	名古屋国際会議場 (名古屋市)	2015/9
127.	<u>望月祐志・奥脇弘次・石川雄太郎</u>	フラグメント分子軌道計算によるNaCl表面と分子の相互作用解析	2015年応用物理学会秋季学術講演会	名古屋国際会議場 (名古屋市)	2015/9
128.	<u>Tokiwa, H.;</u> <u>Okazaki, S.;</u> <u>Otsubo, T.;</u> <u>Ikeda, K.;</u> <u>Morimoto, M.;</u> Kinoshita, T.;	Rational development and biological application of water-soluble fluorescent photochromic diarylethenes which have sugar substituents	23 rd International Symposium on Glycoconjugates	Split, (Croatia)	2015/9
129.	Sando, A.;	Theoretical study of anti-dengue virus inhibitors using the first-principles calculation and MD simulation	23 rd International Symposium on Glycoconjugates	Split, (Croatia)	2015/9
	Abe, T.;				
	Okazaki, S.;				
	Hidari, I.P.J. K.;				
	<u>Otsubo, T.;</u>				
	Teraoka, F.;				
	<u>Ikeda, K.;</u>				
	Suzuki, T.;				
	Morita, K.				
	<u>Tokiwa, H.</u>				
130.	Fujita, Y.;	Theoretical binding analysis of influenza A virus hemagglutinin with sulfatide	The 14th Awaji International Forum on Infection and Immunity	Kobe, (Japan)	2015/9
	Okazaki, S.;				
	Takahashi, T.;				
	Suzuki, T.;				
	<u>Ikeda, K.;</u>				
	<u>Tokiwa, H.</u>				
131.	Matsuo, N.;	Novel in silico analysis between human parainfluenza virus and potent candidates using the first-principles calculations	The 14th Awaji International Forum on Infection and Immunity	Kobe, (Japan)	2015/9
	Okazaki, S.;				
	Takahashi, T.;				
	Suzuki, T.;				
	<u>Ikeda, K.;</u>				
	von Itzstein, M.;				
	<u>Tokiwa, H.</u>				
132.	<u>藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・鈴木隆・池田潔・常盤広明</u>	ウイルス増殖促進シグナルを担うインフルエンザウイルス結合性糖脂質の理論的解析	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学 (船橋市)	2015/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

133.	加藤裕也・横田智洋・Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	梅エキスを先導化合物とした抗インフルエンザ薬の構造活性相関研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
134.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	FMO 法および MD シミュレーションを用いた抗ヒトパラインフィルエンザ化合物に関する理論的解析 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
135.	熊谷茜・岡崎誠司・渡會友祐・榎島誠・山田幸子・ <u>常盤広明</u>	アダマンチル基と2つの三重結合を有するビタミンD誘導体に関する理論的研究 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
136.	夏目継介・岡崎誠司・中野祥吾・伊藤創平・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	RXR パーシャルアゴニストに関する理論的研究 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
137.	亀井貴司・岡崎誠司・石坪江梨花・島野仁・ <u>常盤広明</u>	PPAR α スーパーアゴニストに関する理論的研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
138.	杉山俊樹・岡崎誠司・渡邊泰雄・山田静雄・ <u>常盤広明</u>	脂肪酸複合体の β 受容体に対するシナジー効果に関する理論的研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
139.	立原勇武・中野祥吾・岡崎誠司・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	PyMOL プラグインを用いた糖鎖-レクチンデータベースの効率的活用法	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
140.	Matsuo, N.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical interaction analysis between virus and candidates using the first-principles calculations	第4回感染症若手フォーラム	アテーナ海月(淡路氏)	2015/9
141.	Fujita, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	In silico analysis of viral envelope glycoproteins	第4回感染症若手フォーラム	アテーナ海月(淡路氏)	2015/9
142.	<u>山中正浩</u>	有機分子触媒反応における立体制御機構に関する理論的研究	第116回触媒討論会	三重大学(津市)	2015/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

143.	齋藤義紀, 高橋宏明, 岡本育子, 中島勝幸, 通元夫, <u>黒田智明</u> , 花井 亮, 龔 洵	中国四川省産 <i>Ligularia pleurocaulis</i> の化学的遺伝的多様性	第 57 回天然有機化合物討論会	神奈川県民ホール (横浜市)	2015/9
144.	通 元夫, 星山紀恵, 速水智加, 中島勝幸, 齋藤義紀, 岡本育子, 龔 洵, 花井 亮, <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(4)	第 59 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学 (東大阪市)	2015/9
145.	<u>黒田智明</u> , 稲垣航, 晁 珣, 井上恭輔, 岡本育子, 通 元夫, 龔 洵, 花井 亮	中国横断山脈産 <i>Ligularia hodgsonii</i> の化学的遺伝的多様性	第 59 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学 (東大阪市)	2015/9
146.	齋藤義紀, 岡本育子, 花井 亮, 平井美咲, 松尾洋介, 田中隆, 龔 洵, 廣田 洋, <u>黒田智明</u>	中国雲南省産 <i>Ligularia lankongensis</i> の高度に酸化されたビサボラン化合物	第 59 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学 (東大阪市)	2015/9
147.	八百板康範, 岡本育子, 花井 亮, 青山奈央, <u>黒田智明</u> , 龔 洵	2種の中国産未同定キク科 <i>Ligularia</i> 属植物の化学成分	第 59 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学 (東大阪市)	2015/9
148.	島崎裕紀・ <u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動を利用する分子間相互作用の速度解析法の開発	日本分析化学会 第 64 年会	九州大学 (福岡市)	2015/9
149.	島崎裕紀・ <u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動法によるチモール-硫酸化 β -シクロデキストリン間の分子間相互作用の速度解析	日本分析化学会 第 64 年会	九州大学 (福岡市)	2015/9
150.	小林 翔・速川琴菜・ <u>箕浦真生</u>	6 価ジハロ有機テルル化合物の脱ハロゲン化反応と官能基化	第 26 回基礎有機化学討論会	愛媛大学 (松山市)	2015/9
151.	行本万里子・ <u>箕</u>	嵩高い置換基を有するスル	第 26 回基礎有機	愛媛大学	2015/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>浦真生</u>	フィナートのピリジニウム塩の合成と構造	化学討論会	(松山市)	
152.	時延春輝・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	ピロリン酸で架橋した二核Ru(Et3tacn)錯体の合成と酸化還元挙動	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
153.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	単核ルテニウム-ビス(ターピリジル)アントラセンの合成とルイス酸性金属イオンとの相互作用	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
154.	和田美里・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	複核コバルト錯体触媒による酸素四電子還元反応機構	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
155.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	二核ルテニウム錯体による水の酸化反応における架橋配位子の効果	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
156.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	オキソニウムイオンを含むヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の外部刺激による色変化と結晶構造	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
157.	加藤茜・ <u>松下信之</u>	エチルピオロゲン・テトラシアニド白金(II)錯体電荷移動塩の発光相の湿度依存性	錯体化学会第65回討論会	奈良女子大学(奈良市)	2015/9
158.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリアルエテンのフォトクロミズム	2015年光化学討論会	大阪市立大学(大阪市)	2015/9
159.	伊都将司・池上雄大・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	光異性化反応を用いた空間選択的な励起状態生成	2015年光化学討論会	大阪市立大学(大阪市)	2015/9
160.	稲留徹・八木亮・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリアルエテンの水におけるフォトクロミック挙動	2015年光化学討論会	大阪市立大学(大阪市)	2015/9
161.	蕪木智弘・須見貴樹・宇根佳奈子・五月女光・伊都将司・宮坂博・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	可視光応答型蛍光性ジアリアルエテンの合成	2015年光化学討論会	大阪市立大学(大阪市)	2015/9
162.	藤浪紗栄・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	イオン性置換基を有する水溶性蛍光ジアリアルエテンの合成	2015年光化学討論会	大阪市立大学(大阪市)	2015/9
163.	宇根佳奈子・五	ジアリアルエテン誘導体の光	2015年	大阪市立大学	2015/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	月女光・宮坂博・小島誠也・ <u>入江正造</u>	誘起環開閉反応に対する励起波長・温度依存性	光化学討論会	(大阪市)	
164.	新井悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテンの単一分子追跡による高分子薄膜の動的ミクロ不均一性評価	2015年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
165.	池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	ジアリールエテンの光異性化反応を用いた励起状態の超解像局在化	2015年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
166.	廣口瑛一・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	スターバースト型(D- π) ₅ -A-COOH色素を用いた色素増感太陽電池の創製と特性評価	2015年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
167.	高倉泰・藤原寛・小林健二・ <u>三井正明</u>	枝分かれ多重極子発色団の単一分子蛍光分光	2015年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
168.	森京介・ <u>三井正明</u>	有機金属ハライドペロブスカイトナノ粒子の単一粒子蛍光顕微分光	2015年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
169.	<u>望月祐志</u>	FMO計算プログラムABINIT-MPのものづくり分野への展開	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
170.	坂口正貴・ <u>望月祐志</u> ・ <u>福澤薫</u>	FMO計算におけるフラグメント分割法の詳細検討	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
171.	奥脇弘次・川田修太郎・ <u>望月祐志</u> ・大島広介・小沢拓	FMO計算による粗視化シミュレーションパラメータの算定の試み	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
172.	田中李叶子・ <u>森本正和</u> ・ <u>松下信之</u>	オキソニウムイオンを含む電荷移動鉄錯体のベイポクロミズムとプロトン伝導性	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
173.	加藤茜・ <u>松下信之</u>	エチルビオロゲンとテトラシアニド白金(II)錯体からなる電荷移動塩の発光相の湿度依存性	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
174.	海野紹・ <u>三井正明</u>	単一分子分光による色素-酸化チタン界面電荷移動ダ	第9回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		イナミクス			
175.	<u>三井正明</u> ・海野紹	有機色素-酸化チタン界面電荷移動の単一分子分光	第9回分子科学討論会	東京工業大学(目黒区)	2015/9
176.	高倉 泰・藤原寛・小林 健二・ <u>三井正明</u>	アジマス・ラジアル偏光を用いた枝分かれ多重極子発色団の発光サイトスイッチング共同の解明	第9回分子科学討論会	東京工業大学(目黒区)	2015/9
177.	<u>大山秀子</u>	ポリプロピレンの熱安定性向上と難燃化の試み:スーパーエンジニアリングプラスチックと層状複水酸化物の効果(招待講演)	NPO 法人スーパーコンポジット研究会 第10回講演会	東京工業大学(目黒区)	2015/9
178.	左一八・安倍智子・山藤歩・寺岡文照・ <u>大坪忠宗</u> ・森田公一・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	Deng ウイルス E タンパク質機能を抑制する糖誘導体デザイン	第34回日本糖質学会年会	東京大学(文京区)	2015/8
179.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	硫酸化糖脂質 sulfatide のインフルエンザウイルス糖タンパク質 HA における結合部位の理論的予測	第34回日本糖質学会年会	東京大学(文京区)	2015/8
180.	松尾直也・岡崎誠司・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	ヒトパラインフルエンザに対する新規阻害剤とHN タンパク質との理論的相互作用解析	第34回日本糖質学会年会	東京大学(文京区)	2015/8
181.	Saito, Y.; Ogata, M.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Hanai, R.; Kawahara, T.; Matsuo, Y.; Tanaka, T.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemical and genetic diversity of <i>Eupatorium heteriphyllum</i> collected in China	Inaugural Symposium of the Phytochemical Society of Asia 2015	徳島文理大学(徳島市)	2015/8
182.	Kawabe, H.; Komiyama, T.; Saito, Y.;	New abietane diterpenoids from <i>Salvia grandifolia</i>	Inaugural Symposium of the Phytochemical	徳島文理大学(徳島市)	2015/8

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Tori, M.; <u>Kuroda, C.</u> ; Gong, X.; Ohsaki, A.		Society of Asia 2015		
183.	<u>Kuroda, C.</u> ; Shimizu, A.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Hanai, R.; Gong, X.	Chemical composition of hybrids of <i>Ligularia</i> <i>tongolensis</i> and <i>L.</i> <i>cymbulifera</i>	Inaugural Symposium of the Phytochemical Society of Asia 2015	徳島文理大学 (徳島市)	2015/8
184.	<u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動を利用 する分子間相互作用の速度 解析法	第 28 回バイオメ ディカル分析科 学シンポジウム	長崎大学 (長崎市)	2015/8
185.	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y	Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Kinetic Study of Intermolecular Interaction	The 22nd International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques (ITP2015),	Hersinki, (Finland)	2015/8
186.	<u>宮部寛志</u>	非固定化かつ非化学修飾状 態における分子間相互作用 の速度解析法	イノベーションジ ャパン 2015	東京ビッグサイ ト (江東区)	2015/8
187.	<u>Oyama, H. T.</u> ; Takase, K.; Furuta, M..	Effects of an interfacial reaction on thermal stability and noncombustibility of polypropylene/poly(ether sulfone)	XXIV International Materials Research Congress (IMRC 2015)	Cancun, (Mexico)	2015/8
188.	Tsubuki, M.; Hosozawa, T.; Yokoe, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Studies on the Synthesis of Prenylated Quinoline-2-one Alkaloids, Aspoquinolones	18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis	Barcelona, (Spain)	2015/7
189.	松尾直也・左一 八・寺岡文照・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田</u> <u>潔</u> ・森田公一・ <u>常盤広明</u>	スーパーコンピュータ創薬に よる抗 Dengue ウイルス阻害薬 の設計開発	創薬懇話会 2015	グランドエクシ ブ鳴門 ザ・ロッ ジ (鳴門市)	2015/7

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

190.	<u>Yamanaka, M.</u>	Transition-State Stabilization through Multiple Hydrogen Bonds and Dispersion Interactions in Organocatalysis	39th NAITO Conference	SAPPORO (Japan)	2015/7
191.	Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Nakano, Y.; Shimano, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study of several dipeptidyl peptidase IV inhibitors by the first-principles calculation and molecular dynamics simulation	24th American Peptide Symposium (APS2015)	Orland, (USA)	2015/6
192.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>島崎裕紀</u>	クロマトグラフィックキャピラリー電気泳動(CCE): 分子間相互作用の速度解析法	第13回ホスト・ゲスト化学シンポジウム	東北大学川内北キャンパス (仙台市)	2015/6
193.	<u>Miyabe, K.</u>	Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Analyzing Equilibrium and Kinetic Characteristics of Intermolecular Interaction	The 42nd International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2015)	Geneva, (Switzerland)	2015/6
194.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Total Synthesis of an Enesulfenic Acid	第10回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2015/6
195.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Tautomerization of a Stable Enesulfenic Acid	1 th International Conference on Heteroatom Chemistry	Cean (France)	2015/6
196.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Functionalization of Hypervalent Dihalotetraaryltellurium(VI) by Oxidative Halogenation	1 th International Conference on Heteroatom Chemistry	Cean (France)	2015/6
197.	Hayakawa, K.; Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Difluorination of Hypervalent Tetraaryltellurium(IV) Bearing Dimethylaminophenyl Ligands	1 th International Conference on Heteroatom Chemistry	Cean (France)	2015/6
198.	<u>Morimoto, M.</u>	Making and Breaking Bonds with Light in Crystals:	Gordon Research Conference-Artifi	Massachusetts, (USA)	2015/6

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Diarylethene Crystals That Convert Light into Mechanical Work (招待講演)	cial Molecular Switches & Motors		
199.	<u>岡田拓巳</u> ・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>セルロース系ナノ材料の熱伝導特性</u> (*学199)	平成27年度繊維学会年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/6
200.	<u>山崎大</u> ・ <u>齊藤天菜</u> ・ <u>望月祐志</u> ・ <u>梅田宏明</u> ・ <u>重田育照</u>	コレスキー分解型 MP2,MP3 計算の Xeon Phi での性能評価	日本コンピュータ化学会	東京工業大学 (目黒区)	2015/5
201.	<u>望月祐志</u> ・ <u>川田修太郎</u> ・ <u>中野克洋</u>	カルコゲンを含む多重結合分子のモデル計算	日本コンピュータ化学会	東京工業大学 (目黒区)	2015/5
202.	<u>常盤広明</u> ・ <u>福澤薫</u>	合理的創薬でウイルス感染症を抑え込む ~リレンザ® 開発者からのメッセージ~	第9回CBI学会 FMO研究会	東京工業大学 (港区)	2015/5
203.	<u>山中正浩</u>	キラルプレステッド酸触媒による制御システムの理論的研究	「有機分子触媒による未来型分子変換」第5回公開シンポジウム	沖縄県市町村自治会館 (那覇市)	2015/5
204.	<u>佐藤真</u> ・ <u>山中正浩</u> ・ <u>馬場智明</u> ・ <u>古田巧</u> ・ <u>川端猛夫</u>	アニリン型酸-塩基触媒を用いた分子内アルドール反応の理論的解析	「有機分子触媒による未来型分子変換」第5回公開シンポジウム	沖縄県市町村自治会館 (那覇市)	2015/5
205.	<u>中村裕介</u> ・ <u>大山秀子</u>	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの加水分解挙動	第64回高分子年次大会	札幌コンベンションセンター (札幌市)	2015/5
206.	<u>岡田拓巳</u> ・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>セルロース系ナノ材料の熱伝導特性</u> (*学206)	第64回高分子年次大会	札幌コンベンションセンター (札幌市)	2015/5
207.	<u>山田絵里香</u> ・ <u>森洋輔</u> ・ <u>大山秀子</u>	ポリアミド6/反応性エチレン共重合体における界面反応と物性の検討	第64回高分子年次大会	札幌コンベンションセンター (札幌市)	2015/5
208.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>島崎裕紀</u>	<u>キャピラリー電気泳動を利用する分子間相互作用の速度解析法の開発</u> (*学208)	第75回分析化学討論会	山梨大学 (甲府市)	2015/5
209.	<u>島崎裕紀</u> ・ <u>宮部寛志</u>	<u>キャピラリー電気泳動法によるチモール-硫酸化β-シクロデキストリン間の分子間相互作用の速度解析</u> (*学209)	第75回分析化学討論会	山梨大学 (甲府市)	2015/5

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

210.	加藤幸一郎・ <u>福澤薫</u> ・ <u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道計算に基づく固体表面とペプチドの相互作用解析	理論化学討論会	大阪大学 (豊中市)	2015/5
211.	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y.	<u>Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Kinetic Study of Intermolecular Interaction</u> (* 学 211)	The 39th International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC2015)	Fort Worth, (USA)	2015/5
212.	Nakano, Y.; Ishitsubo, E.; Hiyamizu, K.; Han, L.; Tsuji, T.; Watanabe, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H</u>	Theoretical Interaction Analysis of Free Fatty Acid Receptor, GPR40 and GPR120 with omega-3 and omega-6 FFAs based on FMO Method	12th Asian Congress of Nutrition (ACN2015)	Yokohama, (Japan)	2015/5
213.	坂口正貴・ <u>福澤薫</u> ・渡邊千鶴・ <u>望月祐志</u>	<u>ペプチド結合における新規フラグメント分割方法の検証および精度評価</u> (* 学 213)	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
214.	<u>福澤薫</u> ・渡邊千鶴・沖山佳生・渡邊博文・本間光貴・ <u>望月祐志</u> ・田中成典,	フラグメント分子軌道計算のインシリコ創薬への応用	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
215.	土橋滉平・岩田直人・石坪江梨香・ <u>常盤広明</u> ・鈴木由美子	NHC 触媒反応・求核的アシル化における Breslow 中間体の反応性	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
216.	野田洋史・秋山隆彦・ <u>山中正浩</u>	キラルリン酸触媒を用いたトリフルオロメチル N-H ケチミンの不斉移動水素化反応の理論的研究	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
217.	市之瀬篤・ <u>山中正浩</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を用いた α ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応における触媒活性種の探索	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
218.	宍戸健人・ <u>山中正浩</u>	二点水素結合を介した立体・会合制御を基盤とする超分子型不斉分子触媒の開発	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
219.	土岐将太郎・ <u>山</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触	日本化学会	日本大学	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>中正浩</u>	媒による α ケトエステルの不斉アルキル化反応	第95春季年会	(船橋市)	
220.	堀口耕作・山本絵莉・齊藤巧泰・ <u>山中正浩</u> ・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたジヒドロベンゾジアゼピン誘導体の不斉水素移動型還元反応	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
221.	山本絵莉・ <u>山中正浩</u> ・堀口耕作・齊藤巧泰・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたベンゾチアゾリンによる1,5-ベンゾジアゼピンの不斉水素化反応の理論的研究	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
222.	野本拓実・ <u>山中正浩</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いたインドールと α -置換- β -ニトロアクリレートの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
223.	平井美咲・高木広和・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	酸素官能基化されたピサポラン化合物の合成と NMR スペクトルによる立体構造の区別	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
224.	大友郁美・ <u>黒田智明</u>	両親媒性チオエステルとアミンとの水中反応における疎水基中のカルボニル位置の影響	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
225.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセンで架橋した二核ルテニウム錯体による水の酸化反応(*学225)</u>	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
226.	和田美里・真木英孝・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応の配位子効果(*学226)</u>	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
227.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	<u>非配位ターピリジン</u> を有する単核ルテニウム- <u>ビス(ターピリジル)アントラセン錯体</u> の合成と酸化還元挙動(*学227)	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
228.	行本万里子・原奈摘子・入江達也・鈴木文陽・野田聡・ <u>箕浦真生</u>	複数のトリプチシル基を有する嵩高い置換基の合成	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

229.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリブチシル基を立体保護基とするエンスルフェン酸の反応性	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
230.	浜崎絢子・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	アルファ位に水素を有するチオケトンとジアゾ化合物の反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
231.	一瀬翔・秋葉欣哉・ <u>箕浦真生</u>	超原子価(4-FC ₆ H ₄) ₅ Sb および Tol ₄ Te 間でのリガンド交換反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
232.	速川琴菜・小林翔・ <u>箕浦真生</u>	ジメチルアミノフェニル基を有する超原子価有機テルル化合物の合成と反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
233.	杉崎裕一・石田周平・中村卓哉・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一	<u>NEXAFS による Ag(110)上に合成した(1×1)TiO₂ 超薄膜</u> (*学 233)	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
234.	中村卓哉・杉崎裕一・石田周平・吉川峻策・近葉善・ <u>枝元一之</u>	Ag(100)上における V 酸化物薄膜の合成	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
235.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・山口祐太・滝川早紀・ <u>枝元一之</u>	P 偏析に伴う Fe ₂ P(0001)面の表面電子状態変化	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
236.	田中李叶子・岡澤厚・小島憲道・ <u>松下信之</u>	ヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベイポクロミズムにおける橙色相の解明	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
237.	須見貴樹・蕪木智弘・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	可視光に応答する蛍光性フォトクロミックジアリールエテンの合成	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
238.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリールエテンの合成とフォトクロミック特性	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
239.	深港豪・廣瀬崇至・松田建児・ <u>入江正浩</u>	可視光で可逆的なフォトクロミズムを示すジアリールエテンのための分子設計指針	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
240.	池上雄大・伊都将司・宮坂博	蛍光スイッチングジアリールエテン誘導体を用いた超解	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	像蛍光スポット形成			
241.	新井悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテン誘導体の高分子薄膜中における単一分子追跡	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
242.	宇根佳奈子・奥井千秋・片山哲郎・宮坂博・小島誠也・ <u>入江正造</u>	ジアリールエテン誘導体の環開閉反応に対する励起波長依存性:フェムト秒ダイナミクスと反応量子収率との相関	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
243.	高瀬一希・辰巳優斗・ <u>森本正和</u> ・小島優子・横島智・中村振一郎・内田欣吾	イオン液体の構造を持つ新規ジアリールエテン誘導体の合成とその光応答	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
244.	廣口瑛一・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	新奇な π 電子系スターバースト有機色素を用いた色素増感太陽電池の作製と特性評価	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
245.	海野紹・ <u>三井正明</u>	色素-酸化チタン界面電荷移動に基づく蛍光プリンキング統計の解明	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
246.	山藤歩・阿部智子・左一八・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いた新規抗 Dengue ウイルス阻害剤に対する理論的研究	日本薬学会第 135 年会	兵庫医療大学 (神戸市)	2015/3
247.	古畑光司・細沢拓未・横江弘雅・上森理弘・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	o-アミノフェノール 誘導体を用いた[5-endo-dig]型環化反応の開発	第135回日本薬 学会年会	神戸学院大学 (神戸市)	2015/3
248.	細沢拓未・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	Aspoquinolone 類の全合成研究	第135回日本薬 学会年会	神戸サンボーホ ール (神戸市)	2015/3
249.	横田智洋・細沢拓未・石坪江梨花・加藤裕也・	新規マルチターゲット抗インフルエンザウイルス阻害剤の構造活性相関研究(1)	第135回日本薬 学会年会	兵庫医療大学 (神戸市)	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	五十嵐学・ KIRSHNER Karil N.・ SLIWILAIJARO EN Nongluk・横 江弘雅・鈴木康 夫・ <u>常盤広明</u> ・ 津吹政可				
250.	加藤裕也・細沢 拓未・石坪江梨 花・横田智洋・ 五十嵐学・ KIRSHNER Karil N.・ SLIWILAIJARO EN Nongluk・横 江弘雅・鈴木康 夫・ <u>常盤広明</u> ・ 津吹政可	新規マルチターゲット抗イン フルエンザウイルス阻害剤 の構造活性相関研究(2)	第 135 回日本薬 学会年会	神戸サンボーホ ール (神戸市)	2015/3
251.	石坪江梨花・細 沢拓未・五十嵐 学・KIRSHNER Karl N.・ SRIWILAIJAR OEN Nongluk・ 横江弘雅・津吹 政可・鈴木康 夫・ <u>常盤広明</u>	梅エキス抽出物をリードとし た新規マルチターゲット抗イン フルエンザ薬の合理的設 計開発	第 135 回日本薬 学会年会	神戸サンボーホ ール (神戸市)	2015/3
252.	中野佑香・石坪 江梨花・速水耕 介・韓 カ・辻智 子・渡邊泰雄・ 山田静雄・ <u>常盤 広明</u>	FMO 法を用いた GPR40 およ び GPR120 と ω -3/ ω -6 系不飽 和脂肪酸との理論的相互作 用解析	第 135 回日本薬 学会年会	神戸サンボーホ ール (神戸市)	2015/3
253.	寺岡文照・安倍 智子・左一八・ 鈴木隆・ <u>常盤広 明</u> ・大坪忠宗・ <u>池田潔</u>	新規 Dengue ウイルス感染阻 害剤の合成(V)	第 135 回日本薬 学会年会	神戸サンボーホ ール (神戸市)	2015/3
254.	中村卓哉・杉崎 裕一・石田周 平・吉川峻策・	Ag(100)上における V 酸化物 薄膜の合成と軟 X 線分光に よる評価	第 3 回物構研サ イエンスフェスタ	つくば国際会議 場 (つくば市)	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>近葉善・枝元一之</u>				
255.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・山口祐太・滝川早紀・ <u>枝元一之</u>	遷移金属リン化合物単結晶表面の電子状態	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/3
256.	杉崎裕一・中村卓哉・石田周平・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一・間瀬一彦	<u>NEXAFSを用いた(1×1)TiO₂/Ag(110)の電子状態(*学256)</u>	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/3
257.	吉信淳・近藤寛・坂本一之・小澤健一・櫻井岳暁・ <u>枝元一之</u> ・中辻寛・間瀬一彦・中村潤児	エネルギー変換材料の表面界面物性:VUV/SX放射光分光による研究	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/3
258.	加藤幸一郎・ <u>福澤薫</u> ・ <u>望月祐志</u>	アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2	応用物理学会 春季学術講演会	東海大学 (平塚市)	2015/3
259.	<u>望月祐志</u> ・ <u>福澤薫</u>	フラグメント分子軌道法でナノバイオ界面を見る (招待講演)	応用物理学会 春季学術講演会	東海大学 (平塚市)	2015/3
260.	<u>入江正浩</u>	フォトクロミック分子材料の最前線 (招待講演)	第62回応用物理学会春季学術講演会 分科企画シンポジウム「散逸ゆらぎ制御ナノ電子フォトン系の理論とデバイス構築」	東海大学 (平塚市)	2015/3
261.	<u>Miyabe, K.</u> ; Kamiya, S.	<u>Analysis of Equilibrium and Kinetic Characteristics of Intermolecular Interaction between β-Bromo-cyclodextrin and 2-Phenoxypropionic Acid by Liquid Chromatography(*学261)</u>	Pittsburgh Conference 2015 (Pittcon 2015)	New Orleans, (USA)	2015/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

262.	Shimazaki, Y.; <u>Tsuzuki, S.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Miyabe, K.</u>	<u>Chromatographic Behavior in Reversed-Phase Liquid Chromatography Using Water as the Mobile Phase Solvent</u> (* 学 262)	Pittburgh Conference 2015 (Pittcon 2015)	New Orleans, (USA)	2015/3
263.	<u>枝元一之</u>	Electronic structure of transition metal oxide ultrathin films formed on Ag surfaces	フロンティア表面科学セミナー	物性研 (柏市)	2015/3
264.	<u>和田亨</u>	<u>Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応</u> (* 学 264)	文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「人工光合成」(領域番号 2406), 第3回公開シンポジウム	首都大学東京 (八王子市)	2015/1
265.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	抗インフルエンザウイルス活性を有するフラン誘導体の多面性効果に関する理論解析	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1
266.	伊東佑仁・石坪江梨花・Karl N. Kirshner・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算に基づく抗パラインフルエンザ阻害剤の合理的設計・開発	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1
267.	藤田侑・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザウイルス HA と Sulfatide との理論的相互作用解析	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1
268.	杉崎裕一・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一・間瀬一彦	<u>Ag(110)上に合成した(1×1)TiO₂超薄膜の電子状態</u> (* 学 268)	第28回日本放射光学学会年会・放射光科学合同シンポジウム	立命館大学 (草津市)	2015/1
269.	<u>入江正浩</u>	光機能を創る (招待講演)	名古屋大学物質科学国際研究セ	名古屋大学 (名古屋市)	2014/12

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			ンター・トランスフ ォーマティブ生命 分子研究所 (RCMS-ITbM)セ ミナー		
270.	奥脇弘次, <u>望月 祐志</u> , <u>福澤薫</u> , 小沢拓, 大島広 介, 沖山佳生, 渡邊千鶴,	フラグメント分子軌道計算の 高分子シミュレーションへの 応用の試み(その1)	高分子学会計算 機科学部会研究 会	東京工業大学 (目黒区)	2014/12
271.	Nakano, S.; Okazaki, S.; Yasukawa, K.; Dadashpour, M.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y	Endeavors to bridge a gap between wet and dry science in enzyme engineering	Active Enzyme Molecule (AEM2014)	Toyama, (Japan)	2014/12
272.	<u>森本正和</u>	ジアリールエテンフォトクロミ ック分子結晶の結晶構造と 光機能 (招待講演)	2014 高分子・ハ イブリッド材料研 究センター若手フ ォーラム	東北大学 (仙台市)	2014/12
273.	<u>Irie, M.</u>	New Frontiers in Photochromism (招待講演)	Photochromism School	Dourdan, (France)	2014/12
274.	行本万里子・ <u>箕 浦真生</u>	9-トリプチシル基を有する不 飽和スルフェン酸の合成と性 質	第41回有機典型 元素化学討論会	宇部市文化会 館 (宇部市)	2014/11
275.	小林翔・ <u>箕浦真 生</u>	炭素置換基のみを有する超 原子価有機テルル(IV)の構 造と Berry 擬回転	第41回有機典型 元素化学討論会	宇部市文化会 館 (宇部市)	2014/11
276.	<u>箕浦真生</u>	種々の酸化状態を有する有 機16族元素化合物の合成と 性質 (特別講演)	第41回有機典型 元素化学討論会	宇部市文化会 館 (宇部市)	2014/11
277.	石坪江梨花・ 五十嵐学・Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 細沢拓未・横江 弘雅・津吹政 可・鈴木康夫・	食品由来の天然物を先導化 合物とした新規マルチターゲ ット抗インフルエンザ薬の合 理的設計開発	第32回メディシ ナルケミストリー シンポジウム	神戸 国際会議場 (神戸市)	2014/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>常盤広明</u>				
278.	斧田賢嗣・森田大地・澤田紘実・藤井佳那・石坪江梨花・松野研司・ <u>常盤広明</u> ・黒田照夫・宮地弘幸	ゼニゴケ由来天然物をリード化合物とした新規膜障害性抗 MRSA 薬の創製	第 32 回メディシナルケミストリーシンポジウム	神戸国際会議場(神戸市)	2014/11
279.	寺岡文照・安倍智子・左一八・鈴木隆・ <u>常盤広明</u> ・大坪忠宗・池田潔	新規 Dengue ウイルス感染阻害剤の合成研究(IV)	第 32 回メディシナルケミストリーシンポジウム	神戸国際会議場(神戸市)	2014/11
280.	Wada, T.; Hiraide, N.; Onishi, Y.; Miyazato, Y.	Water oxidation catalyzed by <u>ruthenium complexes having a Ru-C bond</u> (* 学 280)	2014 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014),	淡路島夢舞台国際会議場(淡路市)	2014/11
281.	Dobashi, K.; Iwata, N.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Suzuki, Y.	Experimental and Theoretical Analysis of NHC-Catalyzed Nucleophilic Aroylation	Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts 2nd International Conference (7th Symposium on Organocatalysis)	Tokyo, (Japan)	2014/11
282.	Noda, H.; Akiyama, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical Study on Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Transfer Hydrogenation of Trifluoromethylated N-H Ketimine Using Benzothiazoline	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11
283.	Yamamoto, E.; Horiguchi, K.; Saito, K.; Akiyama, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical Study on the Mechanism of Stereoselectivity in Chiral Phosphorus Acid Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of 1,5-Benzodiazepine Using Benzothiazoline	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

284.	Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Shigeta, T.; Huruta, T.; Kawabata, T.	Theoretical Study of Asymmertic Desymmetrization of 4-Nosylamino-1,7-heptanedio l via 4PPY-Catalyzed Enantioselective Acylation	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11
285.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, Hi.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	Joint Meeting of the Society for Glycobiology (SFG) and the Japanse Society of Carbonhydrates Research (JSCR)	Honolulu, (USA)	2014/11
286.	谷島大介・ <u>大山</u> <u>秀子</u>	一軸延伸処理が水崩壊性ポリ 乳酸ブレンドの構造と加水 分解挙動に及ぼす影響	プラスチック成形 加工学会・成形 加工シンポジ ア'14	朱鷺メッセ (新潟市)	2014/11
287.	石坪江梨花・五 十嵐学・Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 細沢拓未・横江 弘雅・津吹政 可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	抗インフルエンザウイルス活 性を有する天然物の多面性 効果に関する高精度 <i>in silico</i> 解析	第 62 回ウイルス 学会学術集会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2014/11
288.	小西英之・上田 剛・松原美香・ 森敬介・石川吉 伸・橋本博・ <u>常</u> <u>盤広明</u> ・眞鍋敬	ギ酸誘導体の一酸化炭素生 成機構およびこれを用いる 実用的有機合成反応	第 40 回反応と合 成の進歩シンポ ジウム	東北大学 (仙台市)	2014/11
289.	<u>常盤広明</u>	最新の計算科学による脂肪 酸と受容体との理論的精密 解析 (招待講演)	第 13 回ホスファ チジルセリン研究 会	東京海洋大学 (港区)	2014/11
290.	小田木陽・古郡 孝太・山本祥 晴・佐藤真・ <u>山中正浩</u> ・長澤 和夫	グアニジン-ウレア触媒を用 いた速度論的光学分割によ る光学活性β置換テトラロン 誘導体の合成法の開発: (+)-Linorexpin の全合成	第 106 回有機合 成シンポジウム	早稲田大学 (新宿区)	2014/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

291.	土岐将太郎・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による α ケトエステルの不斉アルキル化反応	第106回有機合成シンポジウム	早稲田大学 (新宿区)	2014/11
292.	<u>Oyama, H. T.</u>	Functionalization of Poly(lactic acid) via Alloying and Blending (招待講演)	Hangzhou Normal University	Hangzhou, (China)	2014/11
293.	Furuta, M.; <u>Oyama, H. T.</u>	Development of novel poly(propylene carbonate) alloy (招待講演)	Hangzhou Normal University	Hangzhou, (China)	2014/11
294.	Nakano, Y.; Ishitsubo, E.; Hayamizu, K.; Han, L.; Tsuji, T.; Watanabe, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical Interaction Analysis of Free Fatty Acid Receptor 1 and 4 (FFAR1 and FFAR4) with ω -3 and ω -6 UFFAs based on FMO Method	2nd International Conference on Pharma and Food	Shizuoka, (Japan)	2014/11
295.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	2nd International Conference on Pharma and Food	Shizuoka, (Japan)	2014/11
296.	杉崎裕一・石田周平・中村卓哉・ <u>枝元一之</u> ・掛札洋平・小澤健一・間瀬一彦・近葉善・清宮真由・谷本彩	<u>Ag(110)上に合成した(1×1)TiO₂超薄膜の電子状態</u> (*学296)	第34回表面科学学術講演会	島根県立産業交流会館 (松江市)	2014/11
297.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	遷移金属リン化合物単結晶表面の電子状態	第34回表面科学学術講演会	島根県立産業交流会館 (松江市)	2014/11
298.	<u>Edamoto, K.</u> ; Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.	Comparison of the electronic structure of Ni ₂ P(0001) and Fe ₂ P(0001): Soft X-ray photoelectron spectroscopy	The 7th International Symposium on Surface Science	Matsue, (Japan)	2014/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		study			
299.	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Nakamura, T.; Chikaba, T.; Yoshikawa, S.; Seimiya, M.; Tanimoto, A.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u> ; Ozawa, K.	<u>The electronic structure of a (1×1) TiO₂ thin film on Ag(100): LEED, PES and NEXAFS study(*学 299)</u>	The 7th International Symposium on Surface Science	Matsue, (Japan)	2014/11
300.	Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.; <u>Edamoto, K.</u>	Change in the surface electronic structure of Fe ₂ P(0001) induced by P segregation	The 7th International Symposium on Surface Science	Matsue, (Japan)	2014/11
301.	<u>望月祐志</u> , 冲山佳生, 渡邊千鶴, 野口孝明, <u>福澤薫</u> , 田中成典	<u>ABINIT-MPによる京での性能について(*学 301)</u> (依頼講演)	CBI学会 2014年會	タワーホール船堀 (江戸川区)	2014/10
302.	<u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Watanabe, C.; Honma, T.; Tanaka, S.	<u>Theoretical calculations on proteins with fragment molecular orbital method(*学 302)</u>	CBI conference	Tokyo, (Japan)	2014/10
303.	Ishitsubo, E.; Okazaki, S.; Nakano, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y	THEORETICAL STUDY ON THE ORIGIN OF SUBSTRATE SPECIFICITY OF ALKALINE-D-PEPTIDASE (ADP) BASED ON THE FIRST-PRICIPLES CALCULATIONS 2	第51回ペプチド討論會	徳島大学 (徳島市)	2014/10
304.	<u>常盤広明</u> ・石川岳志・庄司光男・李秀栄・左一八・ <u>池田潔</u>	ウイルス全体の全電子計算による 新規 Dengue ウイルス感染症治療薬の設計開発	第6回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム	筑波大学 (つくば市)	2014/10
305.	中野祥吾・岡崎誠司・ <u>常盤広明</u> ・浅野泰久	産業利用を目指した酵素群の機能解明と合理的設計	第6回「学際計算科学による新たな知の発見・統	筑波大学 (つくば市)	2014/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			合・創出」シンポ ジウム		
306.	細沢拓未・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	プレニル化キノノンアルカロイドであるアスポキノロン類の合成研究	第56回天然有機化合物討論会	高知県立県民文化ホール(高知市)	2014/10
307.	黒田智明・花井亮・清水杏菜・鈴木結里香・渡辺静・山田ひろか・永野肇・通元夫・岡本育子・齋藤義紀・河原孝行・余姣君・龔 洵	数種の中国横断山脈産 <i>Ligularia</i> 雑種の化学成分	第56回天然有機化合物討論会	高知県立県民文化ホール(高知市)	2014/10
308.	<u>Irie, M.</u>	Photochromism of Diarylethene Molecules and Crystals (招待講演)	Le Giornate di Chimica Organica a Pavia	Pavia, (Italy)	2014/10
309.	土橋滉平・岩田直人・石坪江梨花・ <u>常盤広明</u> ・鈴木由美子	求核的アシル化反応の開発研究	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
310.	吉田うらら・ <u>山中正造</u> ・川端猛夫	基質認識型ピロリジノピリジン触媒による幾何異性選択的アシル化反応の理論的研究	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
311.	山本絵莉・ <u>山中正造</u> ・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたベンゾチアゾリンによる1,5-ベンゾジアゼピンの不斉還元反応の理論的研究	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
312.	伊藤結・ <u>山中正造</u>	キラルリン酸触媒の3,3'-位置換基による立体制御の解明: 引力的相互作用と斥力的相互作用	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
313.	行本万里子, <u>箕浦真生</u>	α β 不飽和スルフェン酸からスルフィンへの互変異性化	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
314.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	ヘキサシアニド鉄(II)酸電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベイポクロミズム	第4回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		(優秀ポスター賞)(別紙資料8)			
315.	菅野智成・ <u>大山秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶を含有する・多孔質ポリ乳酸モノリスの創出 (優秀ポスター賞) (別紙資料9)	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2014/10
316.	海野紹・ <u>三井正明</u>	色素-酸化チタン界面電荷移動の単一分子蛍光分光	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2014/10
317.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ホスホール基を有するフォトクロミックジアリールエテンの合成	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
318.	蕪木智弘・須見貴樹・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	可視光に応答する蛍光性フォトクロミックジアリールエテン	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
319.	稲葉航平・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	熱退色型フォトクロミックジアリールエテンの置換基効果	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
320.	千葉宏香・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	交互積層法によるフォトメカニカル分子結晶表面の高分子修飾	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
321.	藤永典子・辰巳優斗・糟野潤・ <u>森本正和</u> ・横島智・中村振一郎・内田欣吾	マラカイトグリーン部位をもつジアリールエテン誘導体のフォト・ハロ・ソルバトクロミズム	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
322.	新井悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテン誘導体の単一分子発光特性	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
323.	南健介・西村直人・ <u>森本正和</u> ・小島優子・横島智・中村振一郎・内田欣吾	ジアリールエテン誘導体の光誘起表面形状変化～分子構造と結晶形の相関～	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
324.	池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジアリールエテン誘導体を用いた超解像蛍光スポット形成	2014年光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

325.	内田欣吾・児玉隆平・須丸公雄・ <u>森本正和</u> ・横島智・中村振一郎	光刺激による亜硫酸ガス発生剤としてのジアリールエテン	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
326.	稲留徹・八木亮・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・松浦智夏・片山哲郎・伊都将司・宮坂博・ <u>入江正造</u>	水溶性蛍光ジアリールエテンの合成	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
327.	海野紹・ <u>三井正明</u>	単一分子蛍光分光による色素-酸化チタン界面電荷移動過程の解明	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
328.	並河知孝・蛭海洋平・玉木健斗・ <u>三井正明</u> ・小林健二・鎌田賢司	分子カプセル化による 9,10-ビス(フェニルエチニル)アントラセンの二光子吸収の増大	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
329.	井川貴詞・石坪江梨花・ <u>常盤広明</u> ・高木晃・赤井周司	計算科学的手法を用いるベンザイン反応の位置選択性発現機構解析—ベンザイン反応の位置選択性をコンピュータで読み解く—	第64回日本薬学会近畿支部大会	京都薬科大学 (京都市)	2014/10
330.	加藤裕也・細沢拓未・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner, Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・鈴木康夫・津吹政可・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗インフルエンザ阻害剤の合成研究	第58回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
331.	佐藤菜摘・石坪江梨花・ <u>常盤広明</u>	密度汎関数理論を用いたシアル酸の水和構造の理論的研究	第58回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
332.	佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広</u>	FR901483 合成におけるチロシノール誘導体の N-アリアル化反応の検討	第58回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>明・津吹政可</u>				
333.	石坪江梨花, 中野佑香, 太田崇文, 川上 勝, <u>常盤広明</u>	3D プリンタを用いた創薬標的受容体および薬物候補化合物の新規 3D 模型の簡易作成とその応用	第 58 回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
334.	<u>入江正浩</u>	光機能を創る (招待講演)	高次複合光応答分子システム第 1 回公開シンポジウム	大阪大学 (豊中市)	2014/9
335.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	<i>In silico</i> analysis based on the first-principles calculations and molecular dynamics simulations of pleiotropic effect of novel inhibitor for influenza virus pathogenesis	13th Awaji International Forum on Infection and Immunity 2014	Nara, (Japan)	2014/9
336.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; <u>Tokiwa, H.</u>	Rational Drug Design of Novel anti-Influenza inhibitors based on Fragment Orbital Method and MD Simulations	3rd International Conference of Drug Design 2014	Oxford, (UK)	2014/9
337.	<u>山中正浩</u>	キラルリン酸触媒反応における反応制御・立体制御機構の解明	2014 年有機反応機構研究会	兵庫県民会館 (神戸市)	2014/9
338.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・金属錯体ドナーからなる電荷移動塩の外部刺激応答	第 8 回分子科学討論会	広島大学 (東広島市)	2014/9
339.	細沢拓未・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> , 津吹政可	プレニル化キノリノンアルカロイドの合成研究	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
340.	平井美咲・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	8, 10 位の酸化されたビサボランモデル化合物の合成と NMR スペクトル	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
341.	通 元夫・高橋宏明・齋藤義紀・中島勝幸・岡本育子・龔 洵・ <u>黒田智明</u> ・花井亮	中国産キク科 <i>Ligularia pleurocaulis</i> の新規化学成分と多様性	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
342.	通 元夫・谷口	中国産キク科 <i>Ligularia</i>	第 58 回香料・香	和歌山大学	2014/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	瑞穂・大坪孝徳・岩本夢子・中島勝幸・岡本育子・齋藤義紀・龔 洵・黒田智明	<i>sagitta</i> の新規化学成分	料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	(和歌山市)	
343.	清水杏菜・井上恭輔・市原麻由、花井亮・齋藤義紀・岡本育子・通 元夫・龔 洵・黒田智明	中国産横断山脈産 <i>Ligularia vellerea</i> および <i>L. melanothyrsa</i> のケモタイプ	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学(和歌山市)	2014/9
344.	齋藤義紀・日高基貴・中島勝幸・岡本育子・通 元夫・河原孝行・松尾洋介・田中隆・龔 洵・黒田智明	中国四川省産 <i>Aquilegia</i> 未同定種の新規アビエタン型ジテルペン	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学(和歌山市)	2014/9
345.	緒方美咲・齋藤義紀・中島勝幸・通 元夫・河原孝行・松尾洋介・田中隆、龔 洵・黒田智明	中国雲南省および重慶市産キク科 <i>Eupatorium heterophyllum</i> の新規セスキテルペイド	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学(和歌山市)	2014/9
346.	八百板康範・龔 洵・黒田智明	中国産キク科 <i>Ligularia liatroides</i> の化学成分	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学(和歌山市)	2014/9
347.	望月祐志・福澤薫・加藤幸一郎・沖山佳生・塚本貴志・宮部寛志・都築誠二・古明地勇人・小沢拓・大畠広介・渡邊千鶴・永田大樹・豊島輝・酒井泉美・奥脇弘次	フラグメント分子軌道計算のナノバイオテクノロジーへの展開(その1)	応用物理学会 秋季学術講演会	北海道大学(札幌市)	2014/9
348.	真木英孝・宮里裕二・和田亨	ビピリジル系配位子を有する複核コバルト錯体触媒による	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		酸素還元反応(*学 348)			
349.	和田美里・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	キサンテンにより架橋された二核コバルト錯体における酸素の四電子還元反応の選択性(*学 349)	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
350.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	ビス(ターピリジル)アントラキノンで架橋した二核ルテニウム錯体による水の酸化反応(*学 350)	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
351.	宮里裕二・谷田貝美那・ <u>和田亨</u>	ピロリン酸架橋型二核 Ru 錯体における支持配位子の交換と性質への影響調査(*学 351)	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
352.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	ヘキサシアニド鉄(II)錯体塩の電荷移動相互作用を利用した酸蒸気による二段階ベイポクロミズム	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
353.	<u>松下信之</u> ・田中李叶子・小中尚・佐々木明登	ベイポクロミック銅(II)錯体の構造未決定相の粉末 X 線構造解析	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
354.	渡邊永治・吉田真那・ <u>松下信之</u>	レドックス活性白金錯体における常磁性緩和の核磁気共鳴による研究	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
355.	上之原和佳・ <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金(II)酸電荷移動塩の発光相の温度・湿度変化	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
356.	橋本愛・ <u>松下信之</u>	単結晶フォトクロミック白金(II)錯塩構築の試みと新規含水塩の結晶構造	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
357.	眞柄勇希・ <u>松下信之</u>	ハロゲン架橋一次元白金錯体スルホコハク酸ジアルキル塩の混合原子価状態のアルキル鎖長依存性	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学(文京区)	2014/9
358.	宮部寛志・神谷諭司	固定相リガンドー試料分子間相互作用のモーメント解析(*学 358)	日本分析化学会第 63 年会	広島大学(東広島市)	2014/9
359.	島崎裕紀・豊島輝・甲原翔太・都築誠二・望月祐志・宮部寛志	逆相液体クロマトグラフィー系における保持挙動の計算化学的研究(*学 359)	日本分析化学会第 63 年会	広島大学(東広島市)	2014/9
360.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	ビピリジン骨格を有する有機アクセプターと鉄錯体ドナー	第 23 回有機結晶シンポジウム	東邦大学(船橋市)	2014/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		からなる電荷移動塩のベ ポクロミズム			
361.	土橋滉平・岩田 直人・石坪江梨 花・ <u>常盤広明</u> ・ 鈴木由美子	求核的アシル化反応の開発 および反応解析研究	第44回複素環化 学討論会	札幌市民ホー ル (札幌市)	2014/9
362.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	International Symposium on Sialoglyco 2014	Gold Coast, (Australia)	2014/9
363.	行本万里子・ <u>箕 浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を有 するチオケトン類および誘導 体の合成と構造	第25回基礎有機 化学討論会	東北大学 (仙台市)	2014/9
364.	和田芳樹・ <u>松下 信之</u> ・大橋直樹	擬一次元白金錯体における 格子緩和状態の生成消滅過 程の励起波長依存性	日本物理学会 2014年秋季大会	中部大学 (春日井市)	2014/9
365.	<u>Miyabe, K.</u>	Development of New <u>Moment Equations for</u> <u>Chromatography Based on</u> <u>Langmuir Type Reaction</u> <u>Kinetics</u> (*学365)	20th International Symposium on Separation Sciences (ISSS 2014)	Prague, (Czech Republic)	2014/8
366.	中野佑香・石坪 江梨花・速水耕 介・韓力・辻智 子・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算および 分子動力学シミュレーション を用いた非エステル型脂肪 酸と脂肪酸受容体との理論 的相互作用解析	日本脂質栄養学 会第23回大会	東京国際交流 館プラザ (江東区)	2014/8
367.	<u>Minoura, M.</u> ; Yukimoto, M	<u>SYNTHESIS AND</u> <u>CHARACTERIZATION OF</u> <u>α,β-UNSATURATED</u> <u>SULFENIC ACID</u> (*学367) (招待講演)	26 th INTERNATION AL SYMPOSIUM ON ORGANIC CHEMISTRY OF SULFUR	ISTANBUL, (TURKEY)	2014/8
368.	Fujiwara, T.; Mori, H.; <u>Komeiji, Y.</u> ; <u>Mochizuk, Y.</u>	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics study on hydrated Ln(III) ions	CSW2014 conference	Tsukuba, (Japan)	2014/8

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

369.	<u>宮部寛志</u>	HPLCを用いる分子間相互作用のモーメント解析法の開発(*学369)	第27回バイオメディカル分析科学シンポジウム	帝京大学 (板橋区)	2014/8
370.	Tanishima, D.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Maekawa, S.; Usugi, S.	Poly(aspartic acid-co-L-lactide) (PAL) and poly(malic acid-co-L-lactide) (PML) as accelerators for hydrolytic degradation of poly(L-lactic acid)(PLLA)	American Chemical Society 248th National Meeting & Exposition	San Francisco, (USA)	2014/8
371.	Shimizu, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Silica xerogels synthesized using silane monomers and poly(dimethylsiloxane) as precursors	American Chemical Society 248th National Meeting & Exposition	San Francisco, (USA)	2014/8
372.	<u>常盤広明</u> ・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・ <u>阿部太洋</u> ・ <u>八木亮</u> ・ <u>高木祐太</u> ・ <u>稲留徹</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>木下勉</u> ・ <u>入江正浩</u>	糖置換基導入による水溶性蛍光フォトクロミック分子の合理的開発と生体系への応用(*学372)	第33回日本糖質学会年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/8
373.	石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算によるムメフラールのインフルエンザウイルス表面糖タンパク質に対する理論的相互作用解析	第33回日本糖質学会年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/8
374.	土岐将太郎・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による α ケトエステルの不斉アルキル化反応	日本プロセス化学会 2014 サマーシンポジウム	船堀タワーホール (江戸川区)	2014/7
375.	市之瀬篤・海津溪介・ <u>山中正造</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を用いた α ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応	日本プロセス化学会 2014 サマーシンポジウム	船堀タワーホール (江戸川区)	2014/7
376.	宍戸健人・ <u>山中正造</u>	二点水素結合に基づく超分子型不斉分子触媒の開発	日本プロセス化学会 2014 サマーシンポジウム	船堀タワーホール (江戸川区)	2014/7
377.	杉崎裕一・ <u>枝元一之</u> ・ <u>掛札洋平</u> ・小澤健一・	光電子分光および X 線吸収端微細構造による Ag(110)上の TiO ₂ 超薄膜の評価(*学	第10回放射光表面科学研究部会シンポジウム・顕	あいち産業科学技術総合センター	2014/7

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	間瀬一彦	377)	微ナノ材料科学 研究会合同シン ポジウム	(瀬戸市)	
378.	<u>枝元一之</u> ・石田 周平・杉崎裕 一・中村卓哉・ 滝川早紀・山口 祐太	Ni ₂ P(0001)および Fe ₂ P(0001) の軟 X 線光電子分光	第 10 回放射光表 面科学研究部会 シンポジウム・顕 微ナノ材料科学 研究会合同シン ポジウム	あいち産業科 学技術総合セ ンター (瀬戸市)	2014/7
379.	<u>黒田智明</u>	中国横断山脈地域における キク科リグリア属植物の化 学成分と生態	第 4 回天然物パ ワーシンポジウ ム	東京大学 (文京区)	2014/7
380.	<u>Irie, M.</u>	Making and Breaking Bonds with Light: Discovery and Development of Photochromic Diarylethenes (Porter Medal Lecture) (招待講演)	XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry	Bordeaux, (France)	2014/7
381.	細沢拓未・石坪 江梨花・五十嵐 学・Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 横江弘雅・津吹 政可・鈴木康 夫・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗イン フルエンザ阻害剤の開発 Part I :合理的設計と理論解 析	創薬懇話会 2014	長良川温泉ホ テルパーク (岐阜市)	2014/7
382.	石坪江梨花・五 十嵐学・Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 細沢拓未・横江 弘雅・津吹政 可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗イン フルエンザ阻害剤の開発 Part II :合理的設計と理論解 析	創薬懇話会 2014	長良川温泉ホ テルパーク (岐阜市)	2014/7
383.	森敬介・小西英 之・石川吉伸・ 橋本博・ <u>常盤広 明</u> ・眞鍋敬	塩基によるギ酸エステルの 分解反応の計算化学的解析	第 60 回日本薬学 会東海支部大会	鈴鹿医療科学 大学 (鈴鹿市)	2014/7
384.	<u>Irie, M.</u>	Diarylethene Crystals that Convert Light into	NIMS Conference 2014	Tsukuba, (Japan)	2014/7

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		Mechanical Work: An Approach to Molecular Machinery (招待講演)			
385.	<u>Morimoto, M.</u>	Photochromism of diarylethene single crystals: photoinduced shape change and photomechanical performance (招待講演)	Breaking and Making Bonds with Light Workshop	Colorado, (USA)	2014/6
386.	<u>望月祐志・福澤薫・沖山佳生・渡邊千鶴・本間光貴・田中成典</u>	<u>フラグメント分子軌道法に基づくタンパク質の理論計算</u> (*学 386)	蛋白質科学会	ワークピア横浜 (横浜市)	2014/6
387.	古郡孝太・小田木陽・佐藤真・ <u>山中正浩</u> ・長澤和夫	テトラロン型 β -ケトエステル α 位の有機触媒的不斉酸化反応を基盤とする β 位及び γ 位の速度論的光学分割	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
388.	野田洋史・舟山浩介・榎山儀恵・寺田眞浩・ <u>山中正浩</u>	キラルビスリン酸触媒を用いた不斉 Diels-Alder 反応の理論的研究	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
389.	長澤裕貴・柴田幸大・鹿又喬平・ <u>山中正浩</u> ・寺田眞浩	キラルリン酸触媒によるアズラクトンとビニルエーテルの直接的不斉アルドール型反応の理論的研究	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
390.	佐藤真・ <u>山中正浩</u> ・長澤和夫・川端猛夫	柔軟な骨格を持つ有機分子触媒を用いた触媒反応の理論的解析	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
391.	Hosozawa, T.; Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part I: Organic Synthesis and Optical Resolution	9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014)	Porto, (Portugal)	2014/6
392.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.;	Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part II Rational Design and in silico Analysis	9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014),	Porto, (Portugal)	2014/6

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H</u>				
393.	森啓二・栗原一 樹・矢部真之 介・ <u>山中正浩</u> ・ 秋山隆彦	ヒドリド転位型分子内 redox 系の連続利用による二重 C(sp ³)-H 結合官能基化反 応の開発	第 105 回有機合 成シンポジウム	東京工業大学 (目黒区)	2014/6
394.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Hosozawa, T.I Yokoe, H.; Tubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H</u>	Novel <i>in silico</i> investigation between pleiotropic inhibitor for multitarget and Influenza virus	3rd isirv Antiviral Group Conference	Tokyo, (Japan)	2014/6
395.	谷島大介・ <u>大山 秀子</u> ・前川真太 朗・宇杉真一	ポリ乳酸系水崩壊性ブレンド の加水分解挙動の研究	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
396.	清水祐子・菅野 智成・ <u>大山秀子</u>	3 官能性シランモノマー/ポリ ジメチルシロキサンを前駆体 とした柔軟性シリカキセロゲ ルの創出	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
397.	菅野智成・ <u>大山 秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶 を含む・多孔質ポリ乳酸モノ リスの生成	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
398.	<u>宮部寛志</u>	<u>固定相リガンドー溶質分子 間相互作用のモーメント解析 法の開発(*学 398)</u>	第 74 回分析化学 討論会	日本大学 (郡山市)	2014/5
399.	島崎裕紀・甲原 翔太・ <u>宮部寛志</u>	<u>水を移動相として使用する逆 相液体クロマトグラフィー系 の分離挙動のモーメント解析 (*学 399)</u>	第 74 回分析化学 討論会	日本大学 (郡山市)	2014/5
400.	小嶋亮平・岡田 智暉・江波幸 樹・ <u>和田亨</u> ・ <u>望 月祐志</u>	1,4,7-トリアザシクロノナン (tacn)を配位とする白金錯体 の電子状態	理論化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/5
401.	岡崎誠司・中野 祥吾・ <u>常盤広 明</u> ・浅野泰久	第一原理計算および MD シ ミュレーションを用いた植物 由来ヒドロキシルゲナーゼの マルチスケールシミュレーシ	日本農芸化学会 2014 年度大会	明治大学 (川崎市)	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		ヨン			
402.	石川岳志・ <u>常盤広明</u>	今こそ高精度計算によるコンピュータ支援型創薬を -ここまでわかる DPP4 阻害薬の違い-	日本薬学会第134 年会ランチョ ンセミナー	熊本大学 (熊本市)	2014/3
403.	<u>常盤広明</u> ・宮地弘幸	ウエットドライ融合型医薬カテゴリーを基盤とする創薬学の可能性	日本薬学会第134 年会シンポジ ウム	熊本大学 (熊本市)	2014/3
404.	佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	[5-endo-dig]型環化反応によるスピロジエノン骨格の構築とFR901483 の不斉合成	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
405.	細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	細胞毒性を有するキノリンアルカロイド aspoquinolone A の合成研究 (日本薬学会優秀発表賞受賞)	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
406.	斧田賢嗣・森田大地・澤田紘実・石坪江梨花・松野研司・ <u>常盤広明</u> ・黒田照夫・宮地弘幸	天然由来 bis(bibenzyl) 骨格を有する新規膜障害性抗MRSA 薬の創製	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
407.	山藤歩・安倍智子・Karl K Kirschner・横江弘雅・津吹政可・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・左一八・ <u>常盤広明</u>	新規デングウイルス感染症治療薬の理論的設計・開発	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
408.	丸藤友彦・石坪江梨花・加来田博貴・山田幸子・榎島 誠・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算およびMD シミュレーションを用いた核内受容体 AF2 インターフェースの動的構造解析	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
409.	石坪江梨花・中野佑香・島野仁・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究 3	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
410.	藤田侑・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池</u>	インフルエンザ HA とスルファチドとの理論的相互作用解	日本薬学会第134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>田潔・常盤広明</u>	析			
411.	石坪江梨花・ Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 鈴木康夫・ <u>常盤 広明</u>	梅エキス抽出物をリードとし たマルチターゲット新規抗イン フルエンザ薬の合理的設 計・開発 (日本薬学会優秀発表賞受 賞)	日本薬学会第 134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
412.	中野佑香・石坪 江梨花・丸藤友 彦・速水耕介・ 韓力・辻智子・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算および MD シ ミュレーションを用いた遊離 脂肪酸と脂肪酸受容体との 理論的相互作用解析	日本薬学会第 134 年会	熊本大学 (熊本市)	2014/3
413.	<u>福澤薫</u> ・渡邊千 鶴・塚本貴志・ 加藤昭史・沖山 佳生・田中成 典・ <u>望月祐志</u>	FMO 電子状態計算による X 線結晶構造の精密化の検討	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
414.	沖山佳生・渡邊 千鶴・ <u>望月祐 志</u> ・坂倉耕太・ 山本純一・野口 孝明・小久保達 信・新宮哲・ <u>古 明地勇人</u> ・ <u>福澤 薫</u> ・中野達也・ 田中成典	<u>ABINIT-MP による京でのフ ラグメント分子軌道計算(* 学 414)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
415.	滝田京子・ <u>山中 正造</u>	キラル銀ビスアミジン触媒を 用いたインドールとニトロア ルケンの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
416.	坂田健・ <u>山中正 造</u> ・吉岡謙・浦 口大輔・大井貴 史	キラルテトラアミノホスホニウ ム塩を用いた高位置・高立 体選択的 1,6-付加反応に関 する理論的研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
417.	海津溪介・ <u>山中 正造</u>	二核亜鉛ビスアミジナート触 媒を用いた α ケトエステルの 不斉ヒドロホスホニル化反応	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
418.	土岐将太郎・ <u>山 中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触 媒による α ケトエステルの不 斉アルキル化反応	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
419.	岸信孝・ <u>山中正</u>	キラル亜鉛ビスアミジン触媒	日本化学会	名古屋大学	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>造</u>	による不斉向山アルドール反応における化学選択性	第 94 春季年会	(名古屋市)	
420.	矢部真之介・栗原一樹・森啓二・秋山隆彦・ <u>山中正造</u>	分子内 redox 反応におけるヒドリド転位の化学選択性に関する理論的研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
421.	小田木陽・古郡孝太・佐藤真・ <u>山中正造</u> ・長澤和夫	グアニジン-ウレア触媒を用いたテトラロン型 β ケトエステル α 位の不斉酸化反応を基盤とする β および γ 位の速度論的光学分割法の開発	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
422.	<u>山中正造</u>	キラルリン酸触媒の反応制御・立体制御機構の解明	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
423.	平井美咲・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	4種のビスボラン側鎖異性体の合成とその NMR	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
424.	高木広和・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	<i>Ligularia lankongensis</i> から単離されたビスボラン型セスキテルペンの合成研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
425.	池上大輔・ <u>黒田智明</u>	アリルシランの水中閉環反応を用いるメチレンラクトン化合物の合成研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
426.	<u>和田亨</u> ・江波幸樹・宮里裕二	<u>1,4,7-トリアザシクロノナン配位子を有する白金錯体の 2 電子酸化還元反応に伴う可逆的構造変化(*学 426)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
427.	和田美里・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>複核コバルト錯体を触媒とする酸素の四電子還元反応における架橋配位子の影響(*学 427)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
428.	真木英孝・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセンで架橋した複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応(*学 428)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
429.	一瀬翔・小林翔・ <u>箕浦真生</u> ・橋爪大輔・笹森貴裕・時任宣博	<u>6 価有機テルル Ph_6Te の精密結晶構造解析(*学 429)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
430.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	速度論的に安定化された 1-ブテン-2-チオール類の合成と構造	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
431.	永松麻由子・行本万里子・ <u>箕浦</u>	9-トリプチシル基を有するゲルマニウム化合物の合成と	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	真生	反応			
432.	杉崎裕一・増田 成悟・中村卓 哉・石田周平・ 掛札洋平・小澤 健一・ <u>枝元一之</u>	Ag(110)上に合成した (1×1)TiO ₂ 超薄膜の電子状 態(*学432)	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
433.	<u>枝元一之</u> ・杉崎 裕一・石田周 平・掛札洋平	Fe ₂ P(0001)面の共鳴光電子 分光	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
434.	石田周平・杉崎 裕一・中村卓 哉・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	遷移金属リン化合物表面の電 子状態	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
435.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・ヘキサシ アニド鉄(II)錯体電荷移動塩 の合成と結晶構造	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
436.	新井悠平・多賀 悠平・竹井敏・ 伊都将司・宮坂 博・宇野何岸・ 高木祐太・ <u>森本 正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテン誘導 体の単一分子発光スイッチ ング特性	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
437.	稲葉航平・ <u>森本 正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	熱退色型フォトクロミックジ アリールエテンの合成	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
438.	稲留徹・ <u>森本正 和</u> ・ <u>入江正浩</u>	中央エテン部位にベンゾチオ フェンを有する蛍光性ジアリ ールエテンの合成	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
439.	八木亮・ <u>森本正 和</u> ・ <u>入江正浩</u>	水溶性フォトクロミックジ アリールエテンの合成	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
440.	高木祐太・松浦 智夏・伊都将 司・宮坂博・ <u>森 本正和</u> ・ <u>入江正 浩</u>	蛍光性ジアリールエテンの合 成-置換基効果と溶媒依存 性	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
441.	池上雄大・伊都 将司・宮坂博・ 宇野何岸・高木 祐太・ <u>森本正 和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジアリールエテン誘導体を用 いた超解像蛍光スポット	日本化学会 第94春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
442.	和田芳樹・ <u>松下 信之</u> ・大橋直樹	擬一次元白金錯体における 自己束縛励起子, ソリトン, ポーラロンの生成消滅過程	日本物理学会第 69回年次大会	東海大学 (平塚市)	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		の励起波長依存性			
443.	<u>和田 亨</u>	<u>Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応</u> (*学 443)	文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「人工光合成」(領域番号 2406), 第 4 回フォーラム	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
444.	Nakajima, S.; <u>Oyama, H. T.</u>	Preparation and thermal property of polypropylene composites containing layered double hydroxides (LDH) with various divalent metals	ACS 247th National Meetings & Exposition	Dallas (USA)	2014/3
445.	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Monolithic porous poly(lactic acid) (PLA) with stereocomplex crystals	ACS 247th National Meetings & Exposition	Dallas, (USA)	2014/3
446.	永田大樹・豊島輝・沖山佳生・ <u>都築誠二</u> ・ <u>宮部寛志</u> ・ <u>望月祐志</u>	<u>逆相液体クロマトグラフィー系の分離挙動に関する計算化学的研究</u> (*学 446)	応用物理学会 春季学術講演会	青山学院大学 (相模原市)	2014/3
447.	<u>枝元一之</u> ・今西沙織・増田成悟・掛札洋平・小澤健一	Ni ₂ P(10-10)の角度分解光電子分光ーリン偏析に伴う表面電子状態の変化	第 31 回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
448.	杉崎裕一・増田成悟・中村卓哉・岡本俊樹・神部祐太・野々上淳・掛札洋平・小澤健一・ <u>枝元一之</u>	<u>X 線吸収端近傍微細構造による Ag(110)上に合成した TiO₂ 薄膜の研究</u> (*学 448)	第 31 回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
449.	吉信淳・近藤寛・坂本一之・小澤健一・櫻井岳暁・ <u>枝元一之</u> ・中辻寛・間瀬一彦・中村潤児	エネルギー変換材料の表面界面物性: VUV/SX 放射光分光による研究	第 31 回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
450.	杉崎裕一・増田成悟・中村卓	<u>光電子分光および X 線吸収微細構造による Ag(110)上の</u>	平成 25 年度日本表面科学会東	東北大学 (仙台市)	2014/3

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	哉・掛札洋平・ <u>小澤健一</u> ・ <u>枝元一之</u>	チタニア薄膜の評価(*学450)	北・北海道支部 学術講演会		
451.	佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	[5-endo-dig]型環化反応によるスピロジエノン骨格の構築とFR901483の不斉合成	学術研究振興資金研究成果発表会	星薬科大学 (品川区)	2014/2
452.	山藤歩・ <u>常盤広明</u>	新規デングウイルス感染症治療薬の理論的開発	糖鎖バイオインフォマティクス若手の会合同セミナー	理化学研究所 (和光市)	2014/2
453.	<u>入江正造</u>	光に応答する分子結晶 (招待講演)	世界結晶年オープニングシンポジウム	日本学術会議 講堂 (港区)	2014/1
454.	石坪江梨花・酒井美帆・堀 隆典・Nongluck Sriwilaijaroen・Sadagopan Magesh・安藤弘宗・石田 秀治・木曾真・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算を用いたマルチターゲット抗インフルエンザウイルス薬の合理的設計開発	3rd Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2014/1
455.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザ NA および HA と梅エキス抽出物 Mumefural との理論的相互作用解析	3rd Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2014/1
456.	杉崎裕一・中村卓哉・石田周平・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	Ag(110)上に合成したTiO ₂ 超薄膜の電子状態(*学456)	第27回日本放射光学学会年会	広島国際会議場 (広島市)	2014/1
457.	中野祥吾・岡崎誠司・ <u>常盤広明</u> ・浅野泰久	第一原理計算に基づくAlkaline-D-peptidase(ADP)の基質特異性の起源に関する理論的研究	第17回生体触媒化学シンポジウム	岡山理科大学 (岡山市)	2013/12
458.	<u>和田亨</u>	ビス(ターピリジル)アントラセ	第23回日本	万国橋国際セ	2013/12

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

		<u>ンを架橋配位子とする二核ルテニウム錯体による水の酸化反応(*学 458)</u>	MRS 年次大会	ンター (横浜市)	
459.	須原義智・廣田佳久・花田典佳・和田昭盛・ <u>常盤広明</u> ・中川公恵・岡野登志夫	ニューロンへの分化を誘導する新規ビタミン K 誘導体の創製	第 341 回脂溶性ビタミン研究委員会	奈良女子大学 (奈良市)	2013/12
460.	小林翔・ <u>箕浦真生</u> ・要 衛・指田春喜	ビス(2-エチニルフェニル)ジカルコゲニド類のヨウ素環化反応	第 40 回有機典型元素化学討論会	近畿大学 11 月ホール (東大阪市)	2013/12
461.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	α -水素を有するスルフィンの合成と反応(*学 461)	第 40 回有機典型元素化学討論会	近畿大学 11 月ホール (東大阪市)	2013/12
462.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	酸化的ジハロゲン化による 6 価ジハロ有機テルル(VI)類の合成(*学 462)	第 9 回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2013/11
463.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	2-アダマンチル基を有する不飽和スルフェン酸の合成と捕捉反応(*学 463)	第 9 回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2013/11
464.	杉崎裕一・石田周平・中村卓哉・岡本俊樹・野々上淳・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	Ag(110)単結晶表面上にエピタキシャル成長させたレピドクロサイト型 TiO ₂ の電子状態(*学 464)	第 33 回表面科学学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2013/11
465.	石田周平・杉崎裕一・井上有彩・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	共鳴光電子分光を用いた Fe ₂ P(0001)面の電子状態分析	第 33 回表面科学学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2013/11
466.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	梅エキス抽出物フラン誘導体を先導化合物とした新規抗インフルエンザ薬の合理的設計開発	第 31 回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ (広島市)	2013/11
467.	渡會友祐・前川和樹・石澤通康・宇野茂之・	共役 diyne とアダマンチル基を側鎖に有する 19- ノルビタミン D 誘導体の立体選択的	第 31 回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ (広島市)	2013/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	MOURIÑO Antonio・榎島 誠・常盤広明・ 山田幸子	合成と生物活性評価			
468.	石坪江梨花・中 野佑香・島野 仁・常盤広明	高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究 2	第 31 回メディス ナルケミストリー シンポジウム	アステールプラ ザ (広島市)	2013/11
469.	斧田賢嗣・森田 大地・澤田紘 実・石坪江梨 花・松野研司・ 常盤広明・黒田 照夫・宮地弘幸	Bis(bibenzyl) 型天然物を先導化合物とした新規膜障害性抗 MRSA 薬の創製	第 31 回メディス ナルケミストリー シンポジウム	アステールプラ ザ (広島市)	2013/11
470.	山藤歩・Karl K Kirschner・左一 八・池田潔・横 江弘雅・津吹政 可・常盤広明	新規デングウイルス感染症治療薬の理論的設計・開発	第 31 回メディス ナルケミストリー シンポジウム	アステールプラ ザ (広島市)	2013/11
471.	前川和樹・工藤 健・渡會友祐・ 石澤通康・内田 光・中林誠・伊 藤暢聡・常盤広 明・榎島誠・山 田幸子	新規 VDR パーシャルアゴニストの立体選択的合成, X 線結晶構造解析, および生物活性	第 31 回メディス ナルケミストリー シンポジウム	アステールプラ ザ (広島市)	2013/11
472.	澤田紘実・森田 大地・斧田賢 嗣・石坪江梨 花・松野研司・ 常盤広明・黒田 照夫・宮地弘幸	Bis(bibenzyl) 型天然物の抗 MRSA 活性発現の分子標的探索	第 31 回メディス ナルケミストリー シンポジウム	アステールプラ ザ (広島市)	2013/11
473.	石坪江梨花・ Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen ・ 鈴木康夫・常盤 広明	第一原理計算を用いたインフルエンザウイルス表面糖タンパク質とマルチターゲット医薬リード天然物との高精度相互作用解析	第 61 回ウイルス 学会学術集会	神戸国際会議 場 (神戸市)	2013/11
474.	山藤歩・伊東祐 仁・Karl N Kirchner・左一 八・池田潔・鈴	デングウイルス感染症の新規薬剤の理論解析及び新規リード化合物の設計	第 61 回ウイルス 学会学術集会	神戸国際会議 場 (神戸市)	2013/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	<u>木隆・常盤広明</u>				
475.	五十嵐学・吉田 玲子・関嶋政 和・ <u>常盤広明</u> ・ 喜田宏・伊藤公 人・高田礼人	計算科学的手法を用いたイ ンフルエンザウイルスヘマグ ルチニンと亜型間交差反応 性抗体との分子間相互作用 の解析	第 61 回ウイルス 学会学術集会	神戸国際会議 場 (神戸市)	2013/11
476.	<u>Yamanaka, M.</u>	Applications in Asymmetric Catalysis Multifunctional Bisamidine Ligand	13th Tateshina Conference on Organic Chemistry	Tateshina, (Japan)	2013/11
477.	中島佐知子・ <u>大 山秀子</u>	<u>ポリプロピレン/2 価の金属種 を変えた層状複水酸化物 (LDH)系コンポジットの熱特 性(*学 477)</u> (ベストポスター賞受賞)	第 21 回プラスチ ック成形加工学 会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
478.	安部早紀・ <u>大山 秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶 を有するポリ乳酸アロイの創 出及び物性解析	第 21 回プラスチ ック成形加工学 会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
479.	片山英雄・ <u>大山 秀子</u>	ポリ乳酸/ポリビニルフェノ ールブレンドにおける相溶性と 熱挙動の検討	第 21 回プラスチ ック成形加工学 会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
480.	森洋輔・中島佐 知子・清水祐 子・黒岩晴子・ <u>大山秀子</u>	ポリアミド 6/反応性エチレン 共重合体ブレンドにおける反 応のメカニズムと物性の検討	第 21 回プラスチ ック成形加工学 会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
481.	菅野智成・ <u>大山 秀子</u>	<u>疎水性シラン/エラストマー 前駆体とする・柔軟性シルカ キセロゲルの生成(*学 481)</u> (ベストポスター賞受賞)	第 21 回プラスチ ック成形加工学 会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
482.	<u>Edamoto, K.</u> ; Imanishi, S.; Kakefuda, Y.; Ozawa, K.	Angle-resolved photoemission study of Ni ₂ P(10-10): Change in the surface electronic structure induced by P segregation	12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructure	Tsukuba, (Japan)	2013/11
483.	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Inoue, A.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u>	Electronic Structure of Fe ₂ P(0001): Resonant photoemission spectroscopy study	12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and	Tsukuba (Japan)	2013/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

			Nanostructure		
484.	<u>海津溪介</u> ・ <u>山中正浩</u>	二核亜鉛ビスアミジナート触媒による α ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応	第104回有機合成シンポジウム	早稲田大学(新宿区)	2013/11
485.	<u>土岐将太郎</u> ・ <u>山中正浩</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による α ケトエステルの不斉アルキル化反応	第104回有機合成シンポジウム	早稲田大学(新宿区)	2013/11
486.	細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	細胞毒性活性を有するキノリンアリカロイド aspoquinolone A の合成研究	第39回反応と合成の進歩シンポジウム	九州大学(福岡市)	2013/11
487.	小嶋亮平・瀬戸根直希・ <u>和田亨</u> ・ <u>望月祐志</u>	ナフチリジンを経橋配位子とするRu-Ru錯体の電子状態に関する理論解析	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
488.	小嶋亮平・上之原和佳・ <u>松下信之</u> ・森寛敏・ <u>望月祐志</u>	テトラシアニド白金錯体-メチルビオロゲン複合系における電子状態解析と構造予測	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
489.	江波幸樹・石川裕騎・宮里雄二・Ernst Horn・ <u>和田亨</u>	tacn 配位子を有する白金錯体の酸化還元に伴う可逆的構造変化(*学489)	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
490.	真木英孝・ <u>和田亨</u> ・宮里裕二	複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応における二座配位子の影響(*学490)	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
491.	平出尚秀・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	ルテニウム-炭素結合を有するルテニウム-ポリピリジル錯体による水の酸化反応(*学491)	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
492.	和田美里・ <u>和田亨</u> ・宮里裕二・真木英孝	ビス(ターピリジル)キサントンを架橋配位子とする複核コバルト錯体による酸素還元反応(*学492)	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
493.	宮里裕二・ <u>和田亨</u>	水の四電子酸化能を有するオキソおよびピロリン酸架橋型二核Ru錯体の合成(*学493)	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11
494.	真柄勇希・ <u>松下信之</u>	ハロゲン架橋一次元混合原子価白金錯体スルホコハクジアルキル塩の液晶性の架橋ハロゲン・アルキル鎖長依存性	錯体化学討論会第63回討論会	琉球大学(西原市)	2013/11

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

495.	<u>藪崎良人</u> ・ <u>松下信之</u>	ビス(<i>o</i> -セミベンゾキノンジイミン)白金系錯体の酸化還元挙動比較	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
496.	<u>上之原和佳</u> ・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・テトラシアニド白金(II)錯体の発光性電荷移動塩の結晶構造と発光特性	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
497.	<u>田中李叶子</u> ・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・ヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベロクロミズム	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
498.	<u>小中尚</u> ・ <u>梅澤いづみ</u> ・ <u>佐々木明登</u> ・ <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金(II)酸塩の外部刺激による構造変化と発光クロモトロピズム	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
499.	<u>渡邊永治</u> ・ <u>吉田真那</u> ・ <u>松下信之</u>	レドックス活性白金錯体の NMR における緩和現象	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
500.	<u>橋本愛</u> ・ <u>松下信之</u>	白金錯体の単結晶フォトクロミズムと結晶化溶媒	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
501.	<u>松尾健司</u> ・ <u>松下信之</u>	テトラシアニドパラジウム錯体の発光性電荷移動塩のアクセプター展開	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
502.	<u>小中尚</u> ・ <u>梅澤いづみ</u> ・ <u>佐々木明登</u> ・ <u>松下信之</u>	発光クロモトロピズムを示すテトラシアニド白金(II)酸塩の粉末結晶構造解析	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
503.	<u>Okiyama, Y.</u> ; <u>Watanabe, C.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Tanaka, S.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	<u>FMO calculations with ABINIT-MP on K-computer(*学 503)</u>	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
504.	<u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Watanabe, N.</u> ; <u>Watanabe, C.</u> ; <u>Okiyama, Y.</u> ; <u>Tanaka, S.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Refinement of Crystal Structures Using Partial Geometry Optimization and Electron Density Calculations Based on the Fragment Molecular Orbital Method	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
505.	<u>Kurauchi, R.</u> ; <u>Tanaka, S.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Kato, A.</u> ; <u>Watanabe, C.</u> ; <u>Okiyama, Y.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	FMO-based cluster analysis for drug design by multi-dimensional scaling	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Nakano, T.				
506.	Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Kato, A.; Tsukamoto, T.; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u>	FMO-based electron density analysis to protein structure refinement	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
507.	<u>Mochizuki, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Watanabe, C.; Kato, K.; Tsukamoto, T.; Nakano, T.; STanaka, S.	FMO calculations for nano-biotechnology	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
508.	石坪江梨花・ Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen ・ 鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算および MD Simulation を用いたインフルエンザウイルス HA および NA をマルチターゲットとする新規阻害剤に関する理論的研究	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
509.	中野佑香・石坪 江梨花・丸藤友 彦・速水耕介・ 韓力・辻智子・ <u>常盤広明</u>	遊離脂肪酸と GPR40 および GPR120 との理論的相互作用解析	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
510.	石坪江梨花・堀 隆典・酒井美 帆・Nongluck Sriwilaijaroen, Sadagopan Magesh・安藤弘 宗・石田秀治・ 木曾真・宮城妙 子・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	特異的シアリダーゼ阻害活性を持つ新規抗インフルエンザ薬の合理的設計・開発	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
511.	石坪江梨花・中 野佑香・ <u>常盤広 明</u>	高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10/
512.	丸藤友彦, 石坪	非エステル型脂肪酸と核内	第 57 回薬学会	帝京大学	2013/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	江梨花, 中野佑香, 速水耕介, 韓力, 辻智子, <u>常盤広明</u>	受容体 PPAR α/γ との理論的相互作用解析	関東支部大会	(板橋区)	
513.	藤田侑・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	新規抗インフルエンザ薬開発を目指したウイルス表面タンパク質 HA とスルファチドとの理論的相互作用解析	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
514.	<u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセンを架橋配位子とする二核ルテニウム錯体触媒による水の酸化反応(*学 514)</u>	文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「人工光合成」(領域番号 2406), 第 2 回公開シンポジウム	立命館大学 (京都市)	2013/10
515.	<u>大山秀子</u>	ブレンド・アロイ化によるポリ乳酸の機能性付与 (招待講演)	第 25 回高分子加工技術討論会	名古屋市工業研究所(名古屋)	2013/10
516.	滝田京子・ <u>山中正浩</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応の開発	第 3 回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2013/10
517.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	α,β -不飽和スルフェン酸の合成とその捕捉反応	第 3 回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2013/10
518.	池上大輔・ <u>黒田智明</u>	テルペン合成を目指したアリルシラン化合物の水中閉環反応に関する研究	第 57 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学 (さいたま市)	2013/10
519.	清水杏菜・花井亮・岡本育子・通元夫・河原孝行・龔洵・ <u>黒田智明</u>	中国雲南省香格里拉県における <i>Ligularia subspicata</i> の複雑な多様性	第 57 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学 (さいたま市)	2013/10
520.	高木広和・平井美咲・宮崎瑠璃奈・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	酸素官能基化されたビサポラン型化合物の合成と 8, 10 位の立体化学	第 57 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学 (さいたま市)	2013/10
521.	通元夫・谷口瑞穂・伊賀砂央里・齋藤義紀・小宮山哲平・大崎愛弓・岡本育子・龔洵・河原	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(2)	第 57 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学 (さいたま市)	2013/10

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	孝行・花井亮・ <u>黒田智明</u>				
522.	通 元夫, 伊賀砂央里, 齋藤義紀, 岡本育子, 龔 洵, 河原孝行, 花井 亮, <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(3)	第 57 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学 (さいたま市)	2013/10
523.	通 元夫, 齋藤義紀, 市原麻由, 岡本育子, 龔 洵, 花井 亮, <u>黒田智明</u>	中国四川省産 <i>Cremanthodium lineare</i> の化学的遺伝的多様性および関連種の化学成分	第 55 回天然有機化合物討論会	同志社大学 (京都市)	2013/9
524.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study of novel multitarget inhibitor for influenza virus by the first-principles calculation and MD Simulation (Young Scientist Program Awardee)	International Conference of 5th Asain Communications of Glycobiology and Glycotechnology 2013	Khon Koen, (Thailand)	2013/9
525.	Ishitsubo, E.; Hori, T.; Sakai, M.; Sriwilaijaroen, N.; Magesh, S.; Ando, H.; Ishida, S.; Kiso M.; Miyagi, T.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Rational design and development of a novel potent and highly specific inhibitor against influenza viral and human neuraminidases	International Conference of 5th Asain Communications of Glycobiology and Glycotechnology 2013	Khon Koen, (Thailand)	2013/9
526.	<u>望月祐志</u> ・沖山佳生・渡邊千鶴・塚本貴志・ <u>福澤薫</u> ・田中成典	<u>フラグメント分子軌道計算に基づくペプチド-シリカの相互作用解析(*学 526)</u>	応用物理学会秋季学術講演会	同志社大学, (京田辺市)	2013/9
527.	<u>望月祐志</u>	<u>ABINIT-MP プログラムの現状の機能紹介と今後の展開(*学 527)</u> (招待講演)	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会-セミナー	機械振興会館 (港区)	2013/9

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

528.	中野祥吾・岡崎誠司・ <u>常盤広明</u> ・浅野泰久	Open and closed structures of GalE-like L-Threonine dehydrogenase from <i>Cupriavidus necator</i> appeared from X-ray crystal structures and molecular dynamics simulation	第86会日本生化学会大会	パシフィコ横浜(横浜市)	2013/9
529.	高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテンの合成-置換基効果と溶媒依存性	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
530.	松浦智夏・片山哲郎・石橋千英・宮坂博・山口忠承・小畠誠也・ <u>入江正浩</u>	ジアリールエテン誘導体の光開環反応ダイナミクスに対する励起波長依存性	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
531.	八木亮・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	水溶性蛍光フォトクロミックジアリールエテンの合成	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
532.	須見貴樹・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジチエニルエテン誘導体の合成	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
533.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	2成分結晶における水素結合を有するジアリールエテンの光反応	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
534.	高見静香・山口忠承・ <u>入江正浩</u>	オレフィン部位に4-メトキシフェニルおよびフェニル基をもつ1-チアゾリル-2-ビニルシクロペンテンのフォトクロミズム	2013年光化学討論会	愛媛大学(松山市)	2013/9
535.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Novel in silico analysis based on the first-principle calculations and molecular dynamics simulations of molecular mechanism of influenza virus pathogenesis	12th Awaji International Forum on Infection and Immunity 2013	Awajishima, (Japan)	2013/9
536.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	<u>ジハロ有機テルル(VI)化合物の合成とその脱ハロゲン化反応(*学536)</u>	第24回基礎有機化学討論会	学習院大学(豊島区)	2013/9
537.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	<u>嵩高い置換基を有するα,β-不飽和スルフェン酸の合成と捕捉反応(*学537)</u>	第24回基礎有機化学討論会	学習院大学(豊島区)	2013/9
538.	<u>入江正浩</u>	光に応答する分子と結晶(招待講演)	第24回基礎有機化学討論会	学習院大学(豊島区)	2013/9
539.	石坪江梨花・	FMO および MD 計算による	第32回日本糖質	大阪国際交流	2013/8

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 鈴木康夫・ <u>常盤 広明</u>	ムメフラールの NA に対する 理論的相互作用解析	学会年会	センター (大阪市)	
540.	<u>常盤広明</u> ・池田 潔・大坪忠宗・ 荘司裕一郎・森 本正和・入江正 造	糖置換基導入による水溶化 フォトクロミック分子の合成と 評価(*学 540)	第 32 回日本糖質 学会年会	大阪国際交流 センター (大阪市)	2013/8
541.	石坪江梨花・堀 隆典・酒井美 帆・Nongluk Sriwilaijaroen・ Sadagopan Magesh・安藤弘 宗・石田秀治・ 木曾真・宮城 妙子・鈴木 康 夫・ <u>常盤広明</u>	特異的シアリダーゼ阻害活 性を持つ新規化合物と viNA/huNeu との相互作用解 析	第 32 回日本糖質 学会年会	大阪国際交流 センター (大阪市)	2013/8
542.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道計算プ ログラム ABINIT-MP の開発 と応用事例(*学 542) (招待講演)	新化学技術推進 協議会-先端化 学・材料技術部 会-研究会	新化学技術推 進協会 (千代田区)	2013/8
543.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道(FMO) 計算の現状と今後(*学 543) (招待講演)	新学術領域「分 子ロボティクス」 研究会	東京工業大学 (港区)	2013/7
544.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道計算の 現状と今後(*学 544) (招待講演)	蛋白質学会年 会	とりぎん文化会 館 (鳥取市)	2013/6
545.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical interaction analysis between Mumefural and influenza virus NA by first-principles calculation and MD Simulations	Drug Discovery & Therapy World Congress 2013	Boston, (USA)	2013/6
546.	Nakano, Y.; Watanabe, Y.; Ito, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H.</u>	In silico analysis of origomerization of β -adrenergic receptor(β AR) by specific fatty acid (FA) compositions	Drug Discovery & Therapy World Congress 2013	Boston, (USA)	2013/6
547.	依田勇佑・菅野	ウレタン結合を含むステレオ	高分子学会	京都国際会議	2013/5

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

	智成・ <u>大山秀子</u>	コンプレックスポリ乳酸の創出		場 (京都市),	
548.	<u>Nagasawa, Y.;</u> <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical Study on Asymmetric Michael Addition of Malonate to Enone Catalyzed by Primary α -Amino Acid Lithium Salt	1st International Conference & 6th Symposium on Organocatalysis	Otsu, (Japan)	2013/5
549.	<u>Yamanaka, M.</u>	The Origin of Enantioselectivity in Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Imines	1st International Conference & 6th Symposium on Organocatalysis	Otsu, (Japan)	2013/5
550.	<u>Nakano, S.;</u> <u>Okazaki, S.;</u> <u>Tokiwa, H.;</u> Asano, Y.	Open and closed structures of GalE-like L-Threonine dehydrogenase from <i>Cupriavidus necator</i> appeared from X-ray crystal structures and molecular dynamics simulation	4th International Symposium on Diffraction Structural Biology	Nagoya, (Japan)	2013/5
551.	<u>Oyama, H. T.;</u> Abe, S.	Highly crystalline poly(lactic acid)(PLA) alloys containing stereocomplexes	Tech Connect World 2013	National Harbor, (USA)	2013/5
552.	<u>Irie, M.</u>	Photochromism of Diarylethene Single Molecules and Single Crystals (招待講演)	Light-Harvesting Processes 2013	Kloster Banz, (Germany)	2013/4

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

<研究成果の公開状況>(上記以外)

シンポジウム・学会等の実施状況、インターネットでの公開状況等
ホームページで公開している場合には、URLを記載してください。

<既に実施しているもの>

ホームページによる成果公表

<http://www2.rikkyo.ac.jp/web/mirai/>

公開講演会、シンポジウム

2014年3月15日

未来分子研究センター2013年度成果報告会(別紙資料1)

2014年4月11日

Sydnonones, Nitrile imines, Carbodiimides and 1H-Diazirenes

Prof. Curt Wentrup The University of Queensland (Australia) (別紙資料10)

2014年5月23日

新規な高周期15族元素低配位化合物の合成と性質

笹森貴裕先生 京都大学化学研究所(別紙資料11)

2014年9月10日

Recent Developments in Photoresponsive Molecules and Nanoparticles

Prof. Neil Robin Branda Simon Fraser University(別紙資料12)

2014年11月20日

Anion-Recognition as a Powerful Tool for Asymmetric Catalysis

Prof. Daniel Seidel Rutgers University(別紙資料13)

2014年11月22日

「元素科学と共に歩んだ半世紀」-元素科学を基盤とする有機合成反応の開発と応用-

玉尾皓平先生 前日本化学会会長、理化学研究所・研究顧問・グローバル研究クラスター長
(別紙資料14)

2014年12月18日

計算化学手法を用いたイオン液体の研究: イオン間相互作用とイオンの輸送物性

都築誠二先生 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門

ソフトマターモデリンググループ 上級主任研究員(別紙資料15)

2015年3月14日

金属を内包したフラレーンの構造と特性:理論計算と実験

永瀬茂先生 京都大学・福井謙一記念研究センター シニアリサーチフェロー

(別紙資料4)

2015年3月14日

未来分子研究センター2013年度、2014年度成果報告会(外部評価)(別紙資料4)

外部評価委員による外部評価を受けるため、2013年度、2014年度の成果をまとめた研究成

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

果報告書を作成し(60部)、更に当日各グループごとに研究成果概要を外部評価委員に報告、質疑応答を行った。後日文書により各評価委員の評価を受け取った。(研究成果報告書は、外部評価委員の他、プロジェクトに参画する研究者、その他関連する学内の研究者に配布。)

2016年12月5日

高周期典型元素を含む新規な π 電子系の創出とその構造・性質:「重い芳香族」化合物の最近の展開

時任宣博先生 京都大学化学研究所所長、京都大学教授、日本化学会欧文誌編集委員長

<これから実施する予定のもの>

2017年3月

未来分子研究センター2016年度成果報告会

14 その他の研究成果等

「12 研究発表の状況」で記述した論文、学会発表等以外の研究成果及び企業との連携実績があれば具体的に記入してください。また、上記11(4)に記載した研究成果に対応するものには*を付してください。

※ 論文や学会発表等になじまない研究である場合は、本欄を充実させること

企業との連携

本プロジェクトの推進および本プロジェクトで得られた成果を実用化するに当たり、以下のよう企業との連携を進めている。

設計グループ

- 1) (株)JSOLと「高分子ミュレーションのための有効パラメータの算定」を共同研究(望月祐志)。
- 2) (株)富士通とNDAを結び、ポスト「京」などの超並列スーパーコンピュータ上でのABINIT-MPプログラム(望月が取りまとめ役開発責任者)の性能評価とチューニング指針の獲得を目指し活動中(望月祐志)。
- 3) (財)RISTと共同でABINIT-MPプログラムの性能評価(望月祐志)。
- 4) 日本水産(株)と共同で、「細胞膜貫通型受容体に対する高度不飽和脂肪酸およびその代謝産物の影響について、結合親和性を指標にコンピューターシミュレーションにて理論解析(常盤広明)」。(2013年以降)
- 5) ベーリンガーインゲルハイム(株)との委託研究として、「第一原理計算を用いたDPP-4阻害剤としての2型糖尿病治療薬の高精度 *in silico* 解析」を行った(常盤広明)。(2013年から2014年度)
- 6) (株)リコムと共同で「エノキタケ抽出物によるアドレナリン β 受容体活性化メカニズムの理論的解析」を行った(常盤広明)。『内臓脂肪から落ちていく! えのき茶ダイエット』2013年 小学館、2015年週間新潮 6月11日号などで引用、紹介。

反応制御グループ

- 7) 分析機器の総合メーカー企業と秘密保持契約を締結し、「ガス/液体クロマトグラフ等の分離剤開発に関する研究」を共同で実施中(宮部寛志)。(2014年12月～現在)

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

物性・機能制御グループ

- 8) 三井化学と共同で「乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法」を研究 (大山秀子)。
- 9) (株)ベテルと共同で「高分子ナノファイバー材料の熱拡散率測定」を研究 (大山秀子、上谷幸治郎)。

特許の出願

本プロジェクトで得られた成果について、特許出願されているものは以下のとおりである。

設計グループ

- 1) “水溶性フォトクロミック分子” 常盤広明、入江正浩、池田潔、大坪忠宗、
(公開日 2014年3月20日 公開番号:WO2014/042087)。(＊特1)

[米国特許]

- 2) “パーシャルアゴニスト活性を持つ新規ビタミンD受容体モジュレーター”常盤広明、工藤健、渡曾友祐、前川和樹 (登録日 2015年4月28日 登録番号:US9,018,194)。

反応制御グループ

- 3) “電気泳動による物質の相互作用の分析方法” 宮部寛志、(出願日 2016年1月19日 出願番号:特願 2016-007834)(＊特3)

物性・機能制御グループ

- 4) “乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法”、(立教大学)大山秀子・安部早紀・柴野桂・(三井化学)宇杉真一、(公開日 2013年11月21日 公開番号:特開 2013-234277)(＊特4)
- 5) “有機無機ハイブリッド多孔質体の製造方法”、大山秀子・菅野智成、(公開日 2015年5月7日 公開番号:特開 2015-086262)(＊特5)
- 6) “ポリ乳酸ステレオコンプレックス組成物多孔質体およびその製造方法”、大山秀子・菅野智成、(公開日 2015年6月25日 公開番号:特開 2015-117309)(＊特6)
- 7) “ポリ乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法”、大山秀子・安部早紀、(公開日 2015年1月8日 公開番号:特開 2015-004054)(＊特7)
- 8) “ポリプロピレンおよびポリエーテルスルホンを含む樹脂組成物”、大山秀子・中山梨菜・古田元信、(公開日 2014年6月5日 公開番号:特開 2014-101467)
- 9) “ポリプロピレンカーボネートを含むポリプロピレン樹脂組成物およびその製造方法”、大山秀子・古田元信、(出願日 2014年8月20日 出願番号:特願 2014-167604)(＊特9)
- 10) “スチレン系熱可塑性エラストマーの中空マイクロカプセルおよびその製造方法”、(産総研)

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

研)竹村文男・(立教大学)大山秀子、(登録日 2014 年 11 月 14 日 登録番号:特許第 5644989 号)

11) “ポリフェニレンスルフィドを含む樹脂組成物およびその製造方法” 大山秀子・古田元信・松下茉由・奈良早織、(登録日 2014 年 11 月 21 日 登録番号:特許第 5649114 号)

12) “生分解性樹脂多孔質体”、大山秀子・中村裕介・小川亮平・加賀山陽史、(出願日 2015 年 5 月 8 日 出願番号:特願 2015-095601)(三井化学との共願)(* 特 12)

13) “ポリ乳酸を含む樹脂組成物およびその製造方法”、大山秀子、(登録日 2015 年 7 月 3 日 登録番号:特許第 5769169 号)

受賞等

1) “The Porter Medal” (European Photochemistry Association, The Inter-American Photochemistry Society and The Asian and Oceanian Photochemistry Association), 入江正造, 2014 年 4 月 (別紙資料 7)

2) 2015 年応用物理学会春季学術講演会にて、設計グループ、望月祐志の共同研究者・加藤幸一郎(みずほ情報総研)の発表「アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2」が第 38 回(2015 年春季)応用物理学会講演奨励賞を受賞。2015 年 3 月 13 日、(応用物理学会 HP <http://www.jsap.or.jp/activities/award/lecture/dai38kai.html>)(別紙資料 16)

3) 望月祐志の研究が日経産業新聞で紹介された。

4) 常盤広明の研究が日経バイオテク ONLINE で紹介された。

5) 和田亨の研究が電気新聞で紹介された。(別紙資料 17)

6) 上谷幸治郎の研究が日刊工業新聞で紹介された。

7) 山中正造の研究成果(論 69)が、Chem. Commun.誌の Vol.50 の表紙論文に選ばれた。

8) 入江正造の研究成果(論 94)が、Chem. Commun.誌の Vol.50 の中表紙の掲載論文に選ばれた。

9) 三井正明(論 111)の研究成果がイギリス王立化学会の Photochemical & Photobiological Sciences 誌の Issue 8 の表紙論文に選ばれた。

15 「選定時」に付された留意事項とそれへの対応

<「選定時」に付された留意事項>

留意事項が付されていない場合は「該当なし」と記載してください。

企業との連携、若手研究者の育成、知財確保などにも配慮されたい。

<「選定時」に付された留意事項への対応>

付された留意事項に対し、どのような対応策を講じ、また、それにより、どのような成果があがったか等について、詳細に記載してください。

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

企業との連携

「14 その他の研究成果等」で述べたように、本プロジェクトの推進のため、および成果の実用化を睨んで全てのグループにおいて企業との連携を図ってきた。特許出願の多くが連携企業との共願となっていることから分かるように、連携により着実に研究成果が上がっており、また成果の社会への還元が実現に向かっている。

若手研究者の育成

本プロジェクトが始まる前(平成24年度)、博士後期課程在籍者は0名であったが、現在6名が博士後期課程に在籍している。これは、本プロジェクト発足に伴う研究環境の整備、公開講演会における国内外の研究者との交流による刺激等の効果と考えられる。これらの学生は、RAとして本プロジェクトの推進に直接的に関与することにより実力を涵養するとともに着実に実績を積んでおり、若手研究者の育成に関して明らかな成果が上がっている。

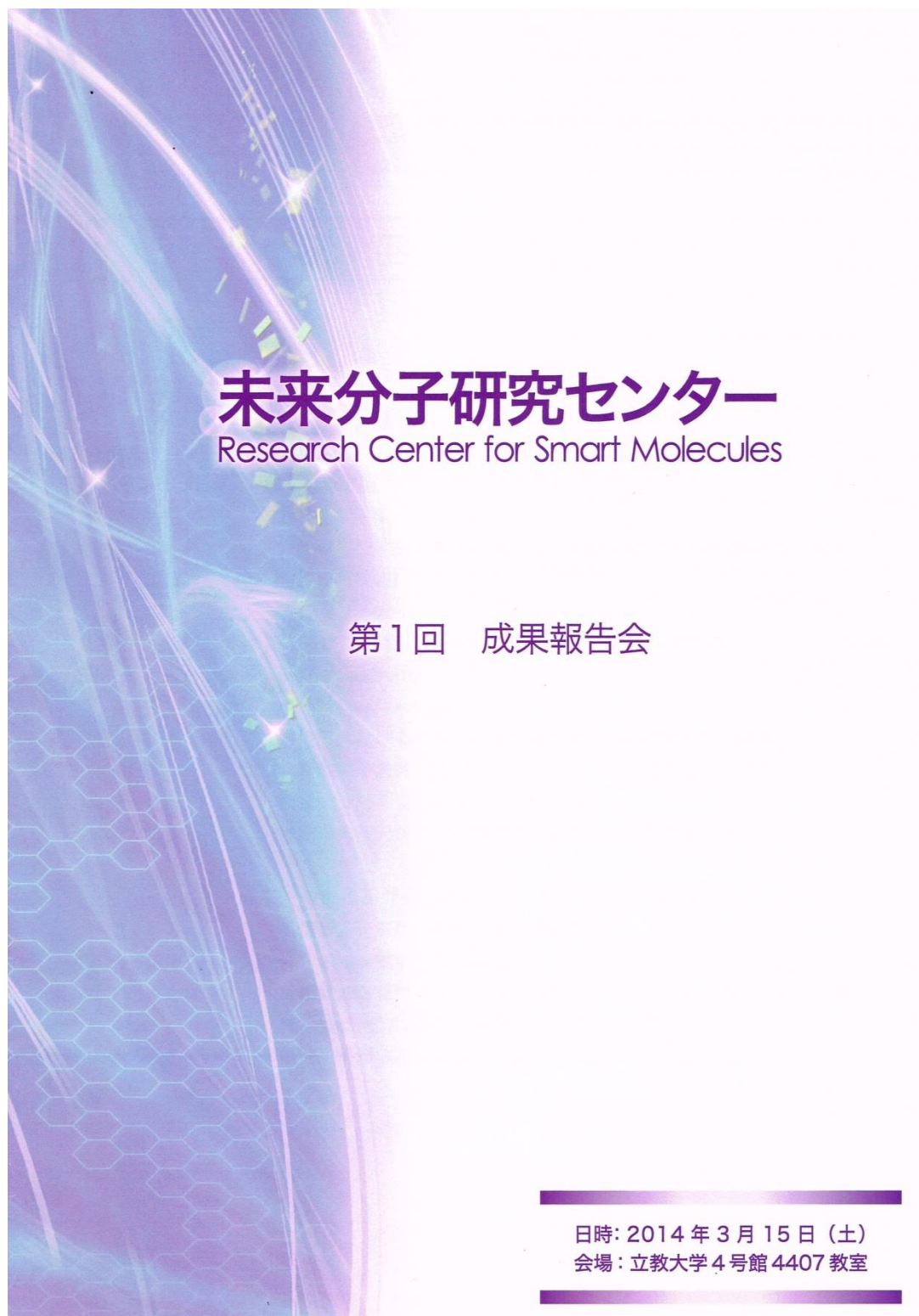
知財確保

「14 その他の研究成果等」で述べたように、本プロジェクトの成果について13件の特許出願が行われており、知財確保の点で着実に実績が上がっている。

—別紙資料一覧—

- 1) 平成 25 年度 成果報告会 冊子
- 2) 平成 25 年度 成果報告書 冊子
- 3) ニュースレターNo.1 冊子
- 4) 永瀬先生講演会、外部評価委員会
- 5) 平成 25・26 年度 成果報告書 冊子
- 6) ニュースレターNo.2 冊子
- 7) 入江正浩 Potal Medal 受賞
- 8) 学会発表 No.314 優秀ポスター賞(2014/10)
- 9) 学会発表 No.315 優秀ポスター賞(2014/10)
- 10) 2014 年 4 月 11 日講演会
- 11) 2014 年 5 月 23 日講演会
- 12) 2014 年 9 月 10 日講演会
- 13) 2014 年 11 月 20 日講演会
- 14) 2014 年 11 月 22 日講演会
- 15) 2014 年 12 月 18 日講演会
- 16) 望月祐志 第 38 回 (2015 年春季)応用物理学会講演奨励賞
- 17) 和田亨 2014 年 12 月 17 日 電気新聞

(別紙資料 1)平成 25 年度 成果報告会
冊子表紙



第 1 回 成果報告会

2014 年 3 月 15 日 (土)

4 号館 4407 教室

13 : 00 センター長挨拶

成果報告 (発表 7 分、質疑応答 2 分)

13 : 05~13:35 1 班 : 分子の機能性の理論的解析と分子設計

望月 祐志 計算化学手法の開発と先導的応用

常盤 広明 未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発

山中 正浩 理論設計支援による機能分子触媒の開発

13 : 35~14:25 2 班 : 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

ホーン・エルンスト Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions

黒田 智明 自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性

和田 亨 論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発

宮部 寛志 流通式分離系を利用する化学特性解析

箕浦 真生 高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発

14 : 40~15:30 3 班 : 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

枝元 一之 表面反応を利用した高機能触媒の開発

入江 正浩 光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成

松下 信之 外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価

森本 正和 結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製

大山 秀子 高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明

(別紙資料 2)平成 25 年度 成果報告書
冊子表紙

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度～平成 29 年度

平成 25 年度研究成果報告書

平成 26 年 6 月

法人名 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 2)平成 25 年度 成果報告書
冊子目次

目 次

1. 研究センターの概要	1
2. 研究センターの設定目的	3
3. 研究センターの研究組織	4
4. 研究センター内の研究の年度毎の進展状況	5
5. 研究成果公表の状況	18



CONTENTS

未来分子研究センターとは

立教大学 未来分子研究センター長 枝元 一之	1
---------------------------------	---

1班「分子の機能性の理論的解析と分子設計」(設計グループ)

計算化学手法の開発と先導的応用 担当：望月 祐志	2
未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発 担当：常盤 広明	3
理論設計支援による機能分子触媒の開発 担当：山中 正浩	4

2班「反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発」(反応制御グループ)

Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions 担当：Ernst Horn	5
自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性 担当：黒田 智明	6
論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発 担当：和田 亨	7
流通式分離系を利用する化学特性解析 担当：宮部 寛志	8
高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発 担当：箕浦 真生	9

3班「物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発」(物性・機能制御グループ)

表面反応を利用した高機能触媒の開発 担当：枝元 一之	10
単結晶金電極への機能性化合物の吸着 担当：池澤 泰成	11
光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成 担当：入江 正浩	12
外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価 担当：松下 信之	13
結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製 担当：森本 正和	14
高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明 担当：大山 秀子	15
機能分子を配位または内包した金属 - 酸化物複合ナノクラスターの創成と評価 担当：掛札 洋平	16

未来分子研究センター 公開講演会

金属を内包したフラーレンの構造と特性： 理論計算と実験

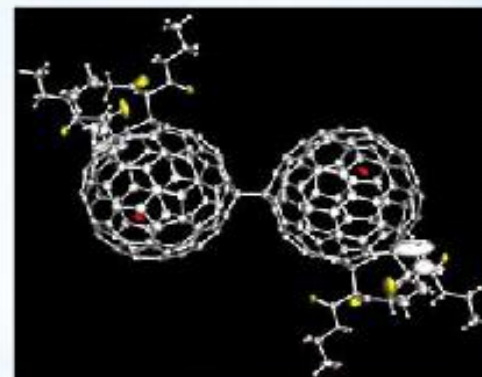
講演者：永瀬 茂 先生

(京都大学・福井謙一記念研究センター・
シニアリサーチフェロー)

日時：3月14日(土)

13:20~14:20

場所：立教大学 池袋キャンパス
10号館 X204教室



1985年に発見された最も対称性の高い分子の一つである C_{60} を代表とするフラーレンは、1990年のアーク放電法による大量合成法と有機溶媒による抽出法の開発を契機として、様々な分野において研究が展開されている。

球状構造をもつフラーレンの内部空間に遷移金属を内包することにより、新しい反応や高い電子移動能などが生まれるが、その基礎研究に重要な、構造決定を中心とした理論計算と実験のインタープレイを紹介する。

連絡先：枝元 (edamoto@rikkyo.ac.jp)

- * 13:15 センター長挨拶
- * 13:20 - 14:20 永瀬先生講演
- * 14:20 - 14:40 休憩
- * 14:40 - 14:50 概要説明(センター長)
- * 14:50 - 15:10 第1班説明
- * 15:10 - 15:30 第2班説明
- * 15:30 - 15:50 第3班説明
- * 15:50 外部評価委員の講評

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度～平成 29 年度

平成 25 年度・平成 26 年度研究成果報告書

平成 27 年 2 月

法人名 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 5)平成 25・26 年度 成果報告書
冊子目次

目 次

1. 研究の概要	1
2. 研究の体制	3
3. 各班の研究の進展状況	5
4. 班員の研究の進展状況	9
5. 研究成果公表の状況	25

(別紙資料 6) ニュースレターNo.2

冊子表紙



平成 25 年度～平成 29 年度
私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

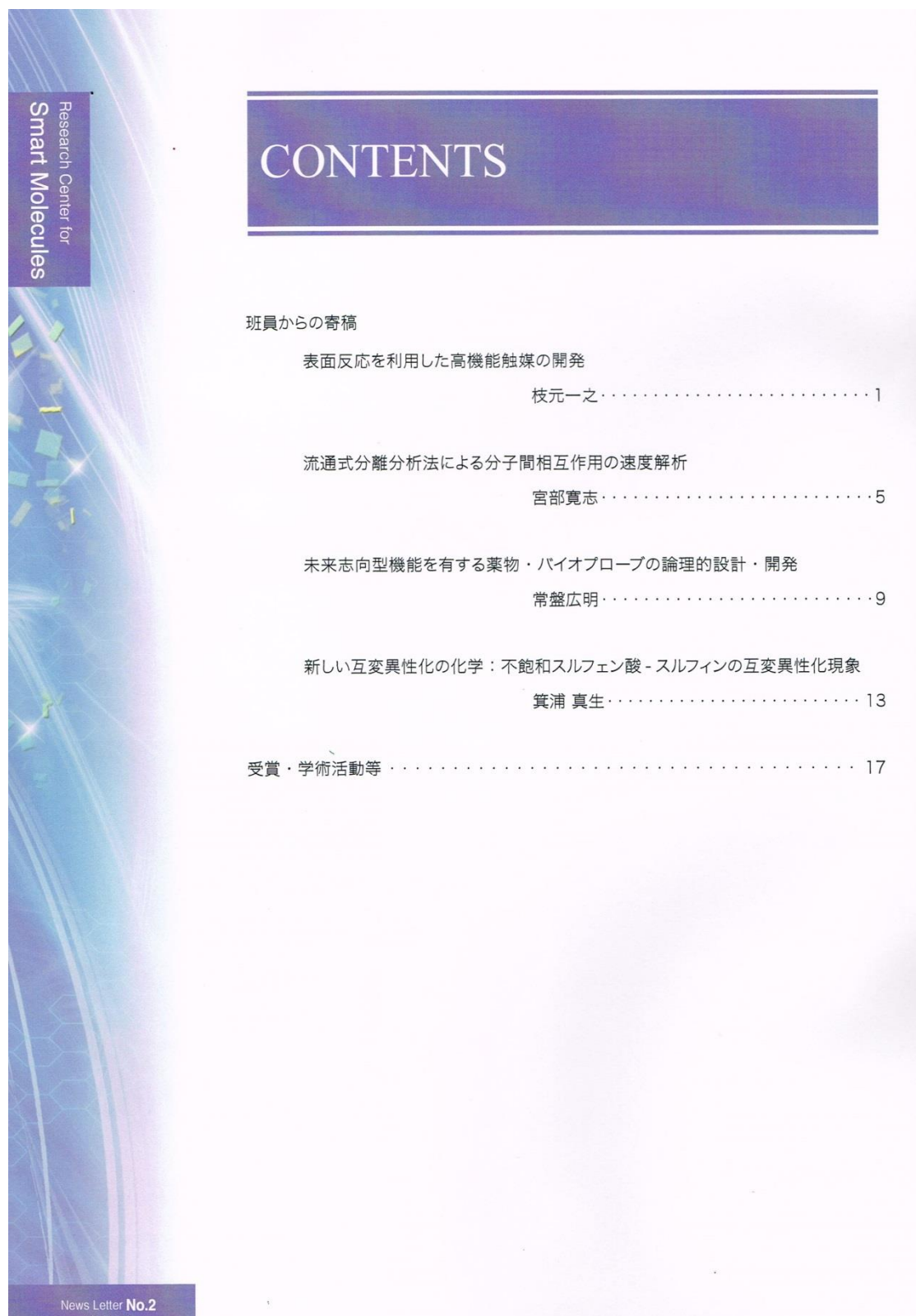
未来分子研究センター ニュースレター
Research Center for Smart Molecules



News Letter No.2

2014 年 11 月

学校法人名 学校法人立教学院
大学名 立教大学
研究組織名 未来分子研究センター
研究代表者 枝元一之



Research Center for
Smart Molecules

CONTENTS

班員からの寄稿

表面反応を利用した高機能触媒の開発
枝元一之…………… 1

流通式分離分析法による分子間相互作用の速度解析
宮部寛志…………… 5

未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発
常盤広明…………… 9

新しい互変異性化の化学：不飽和スルフェン酸-スルフィンの互変異性化現象
箕浦 真生…………… 13

受賞・学術活動等…………… 17

News Letter **No.2**
2014.11

(別紙資料 7) The Porter Medal 受賞

入江正浩 2014年4月

The Porter Medal(欧州光化学協会, 米州光化学会, アジア・オセアニア光化学協会)


ホームページ



The Porter Medal
INTER-AMERICAN
PHOTOCHEMICAL SOCIETY

Home
Previous Winners
Nomination Process

1988 [Lori Porter](#) (George Porter), UK (Founding medal)
1990 [Michael Kasha](#), USA
1992 [Kinichi Honda](#), Japan
1994 [Nicholas J. Turro](#), USA
1995 [J.C. "Tito" Scalano](#), Canada (Special Medal for London ICP)
1996 [Noboru Mataga](#), Japan
1998 [Frans de Schryver](#), Belgium
2000 [Vincenzo Balzani](#), Italy
2002 [Josef Michl](#), USA
2004 [Graham R. Fleming](#), USA
2006 [Howard E. Zimmerman](#), USA and [Hiroshi Masuhara](#), Japan (Two medals awarded)
2008 [Michael R. Wasielewski](#), USA
2010 [David Phillips](#), UK
2012 [Thomas J. Meyer](#), USA
2014 [Masahiro Ine](#), Japan



受賞時の写真



XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry
(Bordeaux)

立教大学ホームページ

未来分子研究センターの入江正浩副センター長がポーターメダルを受賞

2014.05.29

在学生向けニュース, 教職員向けニュース

未来分子研究センターの入江正浩副センター長がポーターメダルを受賞しました。

ポーターメダルは光化学分野に多大な貢献をした科学者に対し隔年で授与されるものです。名称は、1967年にノーベル化学賞を受賞した光化学者、ジョージ・ポーター卿にちなんでいます。受賞者は、ヨーロッパ光化学協会、アメリカ光化学協会、アジア光化学協会の推薦により選出されます。

入江正浩 未来分子研究センター副センター長について

【略歴】

1968年京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻博士課程中退、同年12月北海道大学工学部助手、その後、大阪大学産業科学研究所助教授、九州大学機能物質科学研究所教授、九州大学大学院工学研究科教授。

2007年立教大学理学部教授、特任教授を経て、2014年4月より立教大学未来分子研究センター客員研究員。

この間、2008年立教大学未来分子研究センターを立ち上げ、2008年～2012年まで未来分子研究センター長、2013年より同副センター長。現在に至る。

【研究テーマ】

光に応答する分子と結晶に関する研究

【主な受賞歴】

高分子学会賞 (1988年)、光化学協会賞 (1993年)、ダ・ヴィンチ賞 (1995年)、日本化学会賞 (2005年)、向井賞 (2007年)、紫綬褒章 (2007年)、テオドル・フェルスター賞 (2007年)。

・立教大学未来分子研究センターのサイトはこちら

・入江研究室のサイトはこちら



優秀ポスター発表賞
*CSJ Poster Presentation Award 2014 for
Excellent Research*

立教大学 理学部 化学科 松下研究室

田中 李叶子 殿

発表演題

ヘキサシアニド鉄(II)酸電荷移動塩の酸蒸気による
二段階ベイボクロミズム

貴殿は「第4回 CSJ 化学フェスタ 2014」
において優秀なポスター発表をされましたのでここに表彰いたします

平成26年11月10日

公益社団法人日本化学会

平成26年度会長 榊原 定征

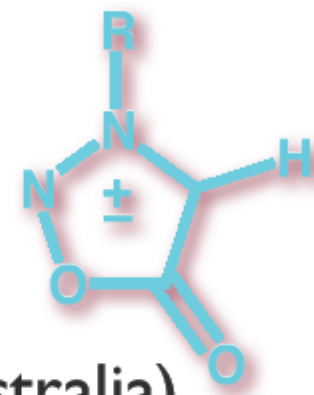




理学部未来分子研究センター講演会

2014年4月11日 (金)

16:40-18:00 14号館 D402教室



Curt Wentrup教授

The University of Queensland (Australia)

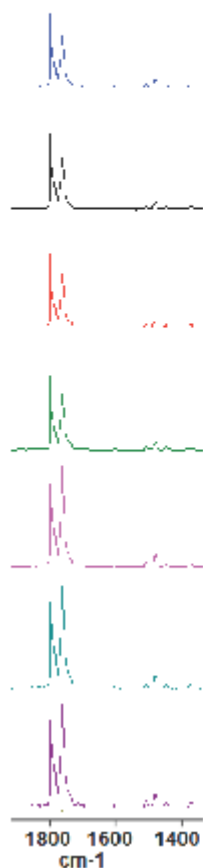
Title: Sydnones, Nitrile imines, Carbodiimides and 1H-Diazirenes

有機反応機構、活性化学種および単寿命種の研究で世界的に著名なCurt Wentrup教授が国内（広島）で開催される国際会議ISRIUM2014に招待講演者として来日・滞在されます。

この機会に、未来分子研究センターで推進している「分子自在制御」の観点で、立教大学において講演をお願い致しました。理学部化学科の教員・学生の方々の参加をお待ちしております。

理学部化学科 箕浦真生

minoura@rikkyo.ac.jp



理学部未来分子研究センター講演会

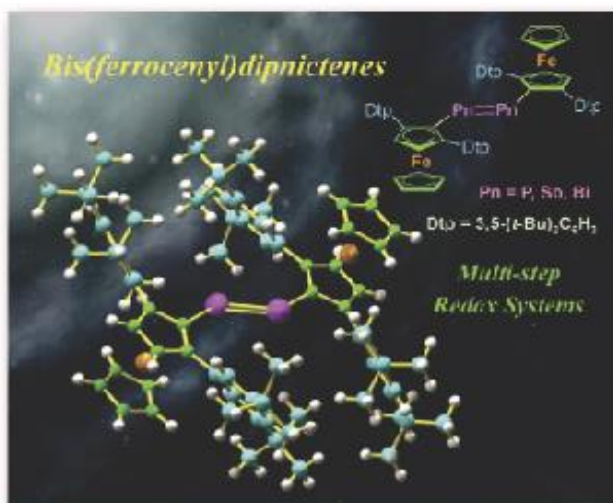
2014年5月23日 (金)

16:40-18:00 4号館 4340教室

京都大学化学研究所 笹森貴裕先生



「新規な高周期15族元素低配位化合物の合成と性質」



有機典型元素・遷移金属元素化学の研究で著名な京都大学化学研究所の笹森貴裕准教授が「有機金属化学特論」の集中講義で来校されます。笹森先生は、平成23年度文部科学大臣表彰若手科学者賞をご受賞されるなど、新進気鋭の若手研究者です。

この機会に、未来分子研究センターで推進している「分子自在制御」の観点で、立教大学において講演をお願い致しました。

理学部の教員・学生の方々の参加をお待ちしております。

理学部化学科 箕浦真生
minoura@rikkyo.ac.jp

講演会のお知らせ

**“Recent Developments in Photoresponsive
Molecules and Nanoparticles”**

**Prof. Neil Robin Branda
(Simon Fraser University)**

**2014年9月10日(水) 16:00～
4号館 4408教室**

Prof. Brandaは、カナダのSimon Fraser Universityの教授であり、フォトクロミック分子などの機能分子材料の研究者として有名です。今回、来日されるのを機会に講演をお願いいたしました。講演会へのご参加をよろしくお願いいたします。

未来分子研究センター主催 問い合わせ先: 入江 正浩

未来分子研究センター 講演会 「Anion-Recognition as a Powerful Tool for Asymmetric Catalysis」

講師: Prof. Daniel Seidel (Rutgers University)

日時: 11月20日 16:40~17:40

場所: 4号館4404教室

Seidel教授は、Rutgers大学にて有機分子触媒を用いた不斉合成から、アミン化合物のC-H結合活性化に基づく官能基化などを活発に研究されている若手研究者です。



Synlett 2014, 25, 783–794.

Org. Lett. 2014, 16, 1012–1015.

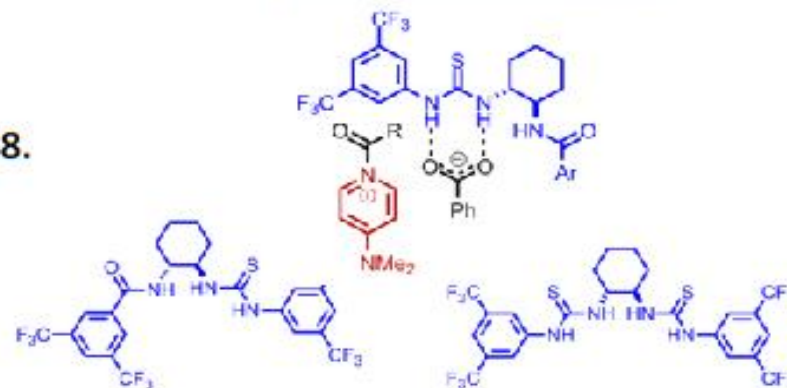
Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52, 14084–14088.

Chem. Commun. 2012, 48, 10853–10855.

J. Am. Chem. Soc. 2010, 132, 13624.

J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 17060–17061.]

担当: 山中 (myamanak@rikkyo.ac.jp)





未来分子研究センター 立教大学理学部 公開講演会 2014

Research Center for Smart Molecules
College of Science, Rikkyo University

日時：11月22日(土)
午後1:40～午後4:30
会場：立教大学(池袋キャンパス)5号館5121教室

玉尾皓平先生特別講演

「元素科学と共に歩んだ半世紀」：
元素科学を基盤とする有機合成反応の開発と応用

玉尾皓平先生：理化学研究所 研究顧問 グローバル研究
クラスタ長、前日本化学会会長、
立教大学連携客員教授

講演概要

- ・新概念「元素科学」提案と「元素戦略」への展開
- ・ニッケル触媒クロスカップリング反応
- ・有機ケイ素化学の有機合成への応用
- ・有機ケイ素化合物の機能性物質科学への応用
- ・汎用性立体保羅基 Rind の導入と新展開
- ・若い人たちに伝えたいこと



- ・未来分子研究センター「設計に基づく分子自在制御の化学」プロジェクト、一般研究発表
立教大学理学部化学科教授：枝元一之、宮部寛志、常盤広明、箕浦真生(各20分)

参加無料です。皆様のご来場をお待ちしております。



立教大学理学部
未来分子研究センター
文部科学省戦略的研究基盤形成支援事業
高度な機能を有する未来分子材料の創製
「設計に基づく分子自在制御の化学」

センター長：枝元一之
副センター長：入江正浩

問合せ先：立教大学理学部
〒171-8501 東京都豊島区西池袋3-34-1
TEL/FAX: 03-3985-4584
E-mail: hightech@rikkyo.ac.jp
池袋駅西口より徒歩10分、
西口地下道C3出口より5分
詳細はWebをご覧ください：
<http://www2.rikkyo.ac.jp/web/mirai/>

未来分子研究センター 講演会

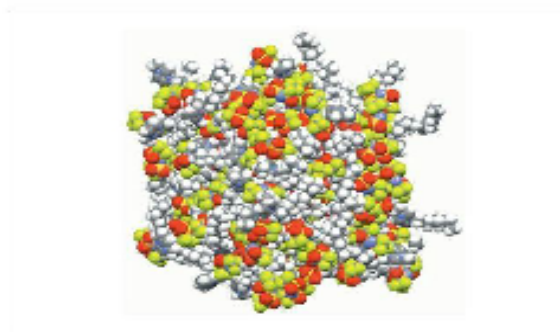
計算化学手法を用いたイオン液体の研究： イオン間相互作用とイオンの輸送物性

講演者：都築誠二先生

産業技術総合研究所
ナノシステム研究部門
ソフトマターモデリンググループ
上級主任研究員

日時：12月18日(木)16:40～18:10

場所：立教大学 4号館 4339教室



分子動力学法で計算したイオン液体の構造

イオン液体はイオンだけからなる液体だが、イオン伝導性、難揮発性、難燃性、良好な電気化学的安定性などの性質を持つことからリチウム系二次電池の安全性を材料面から支える新しい電解質として、活発な研究が進められている。イオン液体は分子性の液体と比べて粘度が大きく、電解質に利用するには粘度を下げる必要がある。カチオンとアニオンの組み合わせにより液体物性が変化することからイオン液体はデザイナー液体とも呼ばれており、適切なイオンを組み合わせればリチウム系二次電池に適した電解質を合成できる可能性がある。計算化学手法でイオン液体の物性を予測できれば、電解質に適したイオン液体を効率的に開発できる可能性がある。本講演では *ab initio* 分子軌道法を用いたイオン間相互作用の解析、古典分子動力学法を用いたイオン液体中のイオンの拡散のシミュレーション、イオンの拡散を支配する要因の研究について紹介する。また、リチウム系二次電池に用いるイオン液体電解質の研究における、計算化学への期待についても触れる。

担当：望月(fullmoon@rikkyo.ac.jp)

(別紙資料 16) 第 38 回 (2015 年春季) 応用物理学会講演奨励賞

望月祐志 2015 年 3 月 13 日

第38回 (2015年春季) 応用物理学会講演奨励賞受賞者紹介



応用物理学会講演会企画運営委員長 民谷栄一

応用物理学会講演奨励賞は、春季及び秋季の学術講演会において、応用物理学の視点から極めて価値のある一般講演論文を発表した若手会員に授与し、これを称えることを目的としています。この度、2015年応用物理学会春季学術講演会で発表された3,535件の一般講演論文及び60件のシンポジウム講演のうち、予め申請のあった750件の口頭、ポスター講演の発表者の中から、厳正な審査の結果、以下の36名の方々が選出されました。誠におめでとうございます。

有機分子・バイオエレクトロニクス		
雨宮 裕希 (山梨大院)	13a-D4-3	1000 S/cmを超えるPEDOT/PSSの合成と電気特性 (山梨大院：堀井 辰衛, 奥崎 秀典)
伊澤 誠一郎 (東大院工/理研 CEMS)	13a-D15-1	ドナー/アクセプター界面第一層のエネルギ準位が有機薄膜太陽電池性能に与える影響 (東大院工 ¹ , 理研CEMS ² , さきがけ ³ : 中野 恭兵 ² , 鈴木 かおり ² , 橋本 和仁 ¹ , 但馬 敬介 ^{2,3})
加藤 幸一郎 (みずほ情報総研)	13p-D5-7	アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2 (日大松戸歯 ¹ , 立教大理 ² , 東大生産研 ³ : 福澤 薫 ^{1,3} , 望月 祐志 ^{2,3})
金城 拓海 (千葉大院融合)	13p-D14-4	超高感度負イオン光電子分光による極性有機薄膜の空準位の直接観察 (千葉大院融合 ¹ , 千葉大工学部 ² , 千葉大先進 ³ : Lim Hyunsoo ¹ , 大澤 祐介 ¹ , 佐藤 友哉 ¹ , 中光 栄仁 ¹ , Thanh Luan Nguyen ¹ , 浦上 裕希 ¹ , 山崎 純暉 ² , 中山 泰生 ¹ , 石井 久夫 ^{1,3})
田中 秀 (阪大院工)	14a-D14-1	透過電子顕微鏡を用いたブルー相液晶の格子構造観察 (阪大院工 ¹ , 阪大電顕センター ² : 吉田 浩之 ¹ , 栗原 隆亮 ² , 西 竜治 ² , 尾崎 雅則 ¹)

深刻なエネルギー・環境問題に直面するなか、究極のエネルギー循環システムを構築する...

ム。この原理を電気エネルギーに活用することができないか。立教大学理学部化学科の和田亨...

全国理系 学び舎 紀行

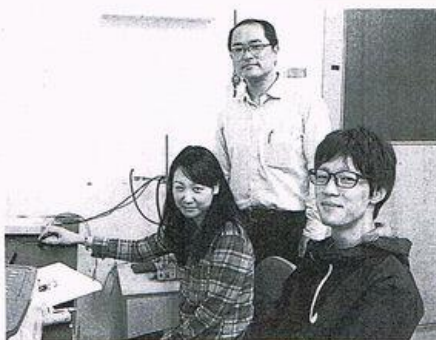
呼吸で獲得しているエネルギーの元は太陽光エネルギー。光合成は太陽光を化学物質(化学エネルギー)...

東京都立教大学理学部化学科

「光合成」の原理を応用

科学を学ぶ 技術を開く

循環システム構築へ



循環型発電システムにつながる研究成果の発掘に取り組むメンバー

和田准教授の目指す研究の最終形態は「太陽光エネルギーでCO2と水からメタン...



和田 准教授

小さい研究室ほど研究がやりやすい。既に存在する触媒の改良も...

可能性を追求 和田准教授の目指す研究の最終形態は「太陽光エネルギーでCO2と水からメタン...



学部概要 教育の特徴は、きめ細かく個性を尊重した少人数制と実験を重視した教育...